陈金全著

群表示论的新途径

上海科学技术出版社



科技新书目：63·212
统一书号：13119·1085
定　价：3.35 元

群表示论的新途径

陈 金 全 著

上海科学技术出版社

群表示论的新途径
陈金全 著
上海科学技术出版社出版
（上海瑞金二路450号）
新华书店上海发行所发行 上海中华印刷厂印刷
开本787×1092 1/16 印张27.25 字数646,000
1984年8月第1版 1984年8月第1次印刷
印数 1—4,200
统一书号：13119·1085 定价：3.35元

序

1974年起，作者和王凡、高美娟同志一起，对传统的群表示理论进行了系统的变革，试图建立一种与量子论的概念和方法相一致的群表示理论，以适应物理和化学工作者的需要. 这一研究于1975年取得了初步的成功[1~8]，得出了处理群表示的一种新方法——本征函数法，解决了传统群表示理论中一些难以解决的问题. 1976~78年间，完成了本征函数法的程序化问题，并首次计算了置换群 S_6 以下的内、外积约化系数，得出了系统的系数表[32]. 1979年则在 SU_n 群和置换群的拉卡系数，9ν 系数，同位标量因子(Isoscalar Factor)或称为母分系数等方面获得了新的进展.

1977年12月，在全国第一次量子化学会议上介绍了新表示理论在量子化学上的应用[33]. 1979年5月，中国核物理学会在苏州举办了"核集团模型和群表示报告会"，在会上较系统地介绍了"群表示的本征函数法"[34]，1979年11月至12月，安徽大学物理系在合肥举办的群表示论讲习班曾以本书的初稿为教材，进行试用. 1981年1至5月作者在美国Drexel大学给研究生开群论课，亦以本书的英译稿作为讲义. 1980至1981年，作者先后在美国Yale大学，Minnesota大学，Maryland大学，Los Alamos国家科学实验室，加拿大的Waterloo大学，Montreal、Dalhousie等大学进行讲学，介绍这一新表示理论. 本书是在上述基础上总结而成的. 高美娟同志参加了本书的部份编写工作，书中有关的具体计算几乎全是由她完成的. 马光群同志参加了第十章的编写工作，并提出了很多建设性的意见. 马光群同志是第一个尝试用本征函数法去处理空间群表示问题的.

在本书的写作过程中，得到了周孝谦教授的热情鼓励、支持和帮助，他仔细地审阅了原稿，吴式枢教授化了很大的精力审阅了我们在1975~1976年寄出的全部文稿. 王凡、高美娟、马光群和陈选根等同志和作者进行了多次讨论，提出了很多有益的建议. 1974~1975年间，冯端教授热情地支持和鼓励我们，使我们增添了前进的勇气和克服困难的信心. 魏荣爵、程开甲、杨立铭、徐光宪、曲钦岳、陆埮、浦富恪、陶瑞宝、阮图南、孙洪洲、吴成礼等教授都以各种方式给予支持，鼓励和帮助. 在编计算程序时得到了何旭初、王家松、姚克国、陈益梅、陈洙天等同志的帮助，作者在此一并表示衷心的感谢.

最后作者还感谢在美国和加拿大期间与M. Hamermesh, B. Bayman, F. Iachello, J. Paldus, D. H. Feng (冯达旋), J. J. Griffin, J. Ginocchio, J. Patera等教授所作的多次富有启发性的讨论，感谢他们提出的宝贵意见和对本工作的热情支持.

南京大学物理系　陈金全

1981年10月

主要记号说明

1．群

记号	说明
G	任一群
$\bar{G}$	内禀群
G_s	G 的一个子群
G/G_s	商群
$G(s)$	正则子群链
$G(s')$	非正则子群链
S_n, $S_f(\mathscr{S}_n, \mathscr{S}_f)$	坐标(态)空间置换群
$S_n(\omega)$	以 (ω) (如 $(\omega)=(1, 3, 4, 7, \cdots)$) 为置换对象的置换群
U_n, $SU_n(\mathscr{U}_n, S\mathscr{U}_n)$	坐标(态)空间酉群
$E(3)$	三维欧基里德群
T	格群
$G(\boldsymbol{k})$	波矢群，小群
F	空点阵的点群
G_0	空间群 G 的点群，晶体点群
$G_0(\boldsymbol{k})$	波矢群的点群，波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群
$G_k=\{\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}\}$	表象群
$G'_k=\{\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'\}$	表象群

2．群元

记号	说明
a, R_a, $R(a)$, R, S, T, $\cdots$,	任一群元
e, ϵ, E	幺元素
p, p_i, $\begin{pmatrix} i \\ p_i \end{pmatrix}$, π,	置换算符
$\mathscr{P}$, $\mathscr{P}_i$, $\mathscr{P}_{ij}$	态置换算符
$Q_\omega=\begin{pmatrix} \omega_0 \\ \omega \end{pmatrix}$	保序置换算符
$\sigma^{n_{\varphi'}}=\sigma^{(\varphi)}$	法线方向在 $\boldsymbol{n}_{\varphi'}$ 的反射面，$\boldsymbol{n}_{\varphi'}$ 跟 x 轴的夹角为 $\varphi'=\varphi+\pi/2$
$C_2^{n_\varphi}=C_2^{(\varphi)}$	$\boldsymbol{n}_\varphi$ 方向上的二度轴，$\boldsymbol{n}_\varphi$ 和 x 轴的夹角为 φ
I	空间反演算符
$T_a=\{\epsilon\|\boldsymbol{a}\}$	平移算符
$\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}$	空间群群元
$\{\gamma\|\boldsymbol{c}\}$	波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 群元
$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$	格群 T 的群元
$\mathscr{R}_i=\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}$	表象群 G_k 的群元
$R_i=\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_i)}\mathscr{R}_i$,	表象群 G'_k 的群元
$\{\beta_\sigma\|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$	空间群 G 相对于波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的陪集代表

3．空间及基矢

记号	说明
L, $\mathscr{L}$	任一表示空间

L_g	群 G 正则表示空间
$L_\nu = P^{(\nu)} L_g$	群 G CSCO-I 的本征空间
$L_{(\nu)k}$	群 G 第 k 个 (ν) 不可约空间
$\mathscr{L}_\nu = P^{(\nu)} \mathscr{L}$	群 G CSCO-I 的本征空间
$L_k = \{u_k\}$	平移算符的本征空间
$L(\boldsymbol{k}) = \{R_l u_k\}$, 或$\{R_l\}$	表象群 G'_k 的 g_l 维(可约)表示空间
$\|\varphi_i\rangle(\|\varphi^i\rangle)$	共(逆)变基矢
$\|\bar{\varphi}_i\rangle$	dual basis
$g_{ij}(g^{ij})$	共(逆)变度规张量
$\|\omega_0\rangle = \|i_1 i_2 \cdots i_n\rangle$	正序态(态指标全不相同)
$\|\omega\rangle = \|i_1 i_2 \cdots i_n\rangle$	正序态(态指标可能相同)
$\|m_1 m_2\rangle = \psi^{(\nu_1)}_{m_1} \psi^{(\nu_2)}_{m_2}$	乘积基矢
$\boldsymbol{R}_n = n_1 \boldsymbol{t}_1 + n_2 \boldsymbol{t}_2 + n_3 \boldsymbol{t}_3$	格矢
$\boldsymbol{K}_m = m_1 \boldsymbol{b}_1 + m_2 \boldsymbol{b}_2 + m_3 \boldsymbol{b}_3$	倒格矢

4. 完备算符集(CSCO)

C	群 G 的 CSCO-I, 或群 G 的 CSCO
$C(s)\,(\bar{C}(s))$	正则子群链 $G(s)$ (内禀子群链 $\bar{G}(s)$) 的 CSCO
$C(s')$	非正则子群链 $G(s')$ 的 CSCO
$M = (C,\ C(s))$	群 G 的 CSCO-II
$K = (C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$	群 G 的 CSCO-III
$C(n)$	置换群 S_n 的 CSCO-I, 或 S_n 的二循环类算符
$\mathscr{C}(n)$	态置换群 $\mathscr{S}_n$ 的 CSCO-I

5. 不可约表示的标志

ν	群 G 的 CSCO-I 的本征值或群 G 不可约表示的编号
$[\nu] = [\nu_1 \nu_2 \cdots]$	配分
ν_0	伴随表示(adjoint representation)
$\bar{\nu}$	逆步(contragredient)表示
ν^*	复共轭表示
$[\tilde{\nu}]$	杨图$[\nu]$的行列转置

6. 表示矩阵

$D(R),\ D(a)$	群元 $R,\ a$ 的表示
$D(C_i)$	类代数的自然表示
$D^{(\nu)}_{mk}(R)$	不可约矩阵元
$D^{(1)}(G),\ D^{(2)}(G),\ D^{(3)}(G),\ D^{(4)}(G)$	点群的四种二维不可约表示,其基矢分别为 (1) 极矢量$(x,\ y)$ (2) 轴矢量$(R_x,\ R_y)$ (3) 轴矢量$(R_y,\ -R_x)$ (4) $(x^2-y^2,\ -2xy)$
$D^{(\nu,k)}_{ab}$	波矢群或表象群的不可约矩阵
$\mathscr{D}^{(\nu,{}^*k)}_{\tau b,\sigma a}$ 或 $\mathscr{D}^{(\nu,k)}_{\tau b,\sigma a}$	空间群的不可约矩阵

7. 不可约基矢

$\psi_m^{(\nu)}$	$G\supset G(s)$不可约基，m代表$C(s)$的本征值，或IR的分量指标
$\psi_\kappa^{(\mu)}$	点群不可约基
$\Psi(\beta\mu\kappa,\ SM_s)$	多电子对称匹配(SALC)波函数
$\psi_m^{(\nu)k},\ \mathring{P}_m^{(\nu)k}$	$G\supset G(s)$ 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$ 不可约基
$\lvert Y_m^{[\nu]}\rangle$	Yamanouchi 基
$\lvert Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\omega_i)\rangle$	$S_{n_i}(\omega_i)$ 群 Yamanouchi 基
$\left\lvert \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle,\ \left\lvert \begin{pmatrix}[\nu]\\ (m)\end{pmatrix}\right\rangle$	酉群 Gelfand 基
$\lvert[\nu],\ \tau{}^{[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2}\rangle$	$S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 不可约基
$\lvert[\nu],\ \tau{}^{[\nu_1][\nu_2]}_{W_1\ W_2}\rangle$	$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 不可约基
$u_k=e^{i(k+K_m)\cdot r}$	格群的不可约基
$u_{\alpha k}=\{\alpha\lvert \boldsymbol{v}(\alpha)\}u_k$	空间群一般星的不可约基
$u_{ka}^{(\nu)}$	波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 或表象群 G_k 的不可约基
$u_{k_\sigma a}^{(\nu)}=\{\beta_\sigma\lvert \boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}u_{ka}^{(\nu)}$	空间群的不可约基
$u_{ka}^{(\nu)b}$	$G_k^t\supset G(s)$ 和 $\overline{G}_k^t\supset\overline{G}(s)$ 不可约基

8. 系数

$C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$	CG 系数，置换群 CG 系数
$C^{(\mu)\tau\kappa}_{\mu_1\kappa_1,\mu_2\kappa_2}$	点群 CG 系数
$C^{(\nu)\tau,W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}$	酉群 CG 系数
$C^{(\nu'')\theta,k''\sigma''a''}_{\nu k\sigma a,\nu'k'\sigma'a'}$	空间群 CG 系数
$C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}$	置换群外积约化系数(ORC)
$C^{(\nu)\tau,\beta\Lambda}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}$	$G\supset G_1$ 同位标量因子(ISF)
$C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$	$S_n\supset S_{n-1}$ ISF，或 $S_n\supset S_{n-1}$ 外积 ISF
$C^{[\nu]\beta,\tau[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{[\sigma]\theta\sigma'\sigma'',[\mu]\varphi\mu'\mu''}$	$S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ ISF，或 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 外积 ISF
$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}$	$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF，　或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF
$C^{[\nu]\tau,\beta ST}_{[\nu_1]\beta_1S_1T_1,[\nu_2]\beta_2S_2T_2}$	$SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF
$C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2}$	$SU_{2l+1}\supset SO_3$ ISF

$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rvert [\nu],\ \tau{}^{[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2}\rangle$，或$\langle[\nu]m\lvert\tau[\nu_2]m_2\rangle$(或$\langle[\nu]m\lvert[\nu_2]\rangle$，当$[\nu_2]=[2]$或$[11]$时)，

S_n 群 Yamanouchi 基到 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ IR 基的表象变换系数(SNSTC)

$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rvert [\nu],\ \tau{}^{[\nu_1][\nu_2]}_{W_1\ W_2}\rangle$	SU_{m+n} 群 Gelfand 基到 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ IR 基的表象变换系数
$R^{[\nu]k}(\omega)$	归一系数

9. 其它

$\delta_p,\ \delta_a,\ \delta_\omega,\ \delta_t$	置换宇称
Λ_m^ν	Yamanouchi 基相因子

$\epsilon_i(\nu_1\nu_2\nu_\tau)$	相因子
g	有限群的阶，紧致李群的群体积
r	李群的阶(order)
l	李群的秩(rank)
$g_i(g(\varphi))$	有限群 i 类元素数(李群 φ 类元素的体积)
$N(N')$	类的数目(表象群 G'_k 中线性独立的类算符数目)
h_ν	IR(ν)的维数
$\tau,\ \theta,\ \varphi,\ \beta$	多重性指标
$C_i,\ C(\varphi)$	类算符
$\langle\nu_1\Vert T^{(\nu)}\Vert\nu_2\rangle^{(\tau)}$	不可约矩阵元(根据 Rose 定义)
$P^{(\nu)}$	投影算符
$P_m^{(\nu)k}$	广义投影算符
C_{ij}^k	有限群结构常数
$C_{\rho\sigma}^\tau$	李代数结构常数
$(\nu_1\nu_2\nu)$	乘积表示$(\nu_1)\times(\nu_2)$中 IR(ν)出现的次数
$\{\nu_1\nu_2\nu\}$	置换群外积$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$中，IR$[\nu]$出现的次数
$\chi_i^{(\nu)}(\chi^{(\nu)}(\varphi))$	i 类(φ 类)特征标
$\chi(R_a)$	群元 R_a 的特征标

内容简介

本书系统地介绍了一种新的群表示理论．其特点是用量子力学中狄拉克的完备算符集理论作为群表示论的基础．理论本身简明易懂，方法简单，使用方便．较之传统的群表示论有很多优点。书中也讨论了新、老群表示论之间的联系，所用的记号和位相约定都尽可能和传统的一致．因此掌握了这一理论也可毫无困难地阅读用传统表示论处理问题的参考书和文献．

本书是针对有线性代数和初等量子力学基础的读者写的，因此起点较低．但本书所要达到的目标却比较高，内容较丰富，对置换群、酉群、点群和空间群的特征标、不可约基和不可约矩阵元、CG 系数、母分系数或同位标量因子都作了详细讨论，并附了一些常用的系数表．对群论在多粒子体系中的应用也作了阐述．

本书可作为物理或量子化学专业的大学生或研究生的教材，也可供基本粒子、原子核、原子、分子、固体物理工作者以及大专院校有关专业师生参考．

本书所阐述的求群表示的本征函数方法于 1982 年获全国自然科学四等奖。

目　录

全书重要表格目录

引 言

群论和量子论

群表示理论在量子物理学中起着很重要的作用，是物理学(包括原子、分子、固体、原子核和基本粒子各个领域)和量子化学等学科中一种很重要的数学工具. 有关群论的著作多得不胜枚举，但是所有这些著作都是属于同一种类型的，总包含着一大堆数学家所用的术语，一大堆定义、引理、定理等. 因此一些初学者学过一些群论著作后，往往抓不住要领，而是象Lipkin(1965)所说，得到的只是一个模糊的印象. 因此有些人竟把群论看成一种高级奢侈品(high luxuary). Соколов(1956)在一篇文章中写道："由于群论，尤其是置换群的表示和特征标理论，甚至对于专家来说也是极其困难的，因而历史上曾出现过反对量子力学中的所谓'群瘟'(group pest)的倾向". Salam(1963)也曾经说过："1951 年我有幸听了拉卡(Racah)教授在普林斯顿作的李群讲演，听完讲演之后，我想这真是太难了，我不可能学会它…." Salam 还指出了传统群表示理论的症结所在，即它是非物理的. 群论这个数学分支是早在量子力学出现之前就由数学家独立创造的，不象微积分那样是由物理学家和数学家共同创造的，因此群论对物理学家来说是一种"舶来品"，学起来困难，用起来不顺手. 其次传统群论对各种群的表示也没有一个统一的处理方法，解决具体群的表示问题还需特殊的技巧. 点群是点群的一套，空间群是空间群的一套，置换群又完全是另一套. 李群和有限群之间更是隔着一道鸿沟. 这些都严重地阻碍了群论在物理和化学工作中的广泛应用.

能不能使群论让物理和化学工作者掌握起来容易一些呢？我们感到群论和量子论之间有着深刻的内在联系. 量子力学中处理的是力学量和量子态，它们的数学表示是线性算符和态矢量；群表示论讨论的则是群元算符的表示和荷载该表示的基矢量，两者十分相似，只是由于历史的原因才造成了今天这种互相脱节的局面. 如果我们按量子力学精神对群表示论进行适当改造，应该可以使群论和量子论之间的关系犹如微积分和经典物理那样融洽. 不少人都表示过类似的愿望(如 Gamba, Killingbeck 等)，在李群表示论方面，经过 Racah, Biedenharn 等人的努力，取得了较大的进展，而有限群表示论方面则还是传统的一套. 我们在 Racah 理论的启发下，把量子力学中的完备算符集(Complete set of commuting operators, 记为 CSCO)概念引进群表示论，给出了一种完全按量子力学方法处理问题的群表示论. 其特点是：概念简单；与量子力学关系密切，因此便于理解和应用. 如果我们把群表示论中用的语言改用量子力学表象理论语言，则群表示论和量子力学表象理论之间的关系就清楚地显现出来了. 我们可以作以下对照：

群表示论术语	量子力学表象理论术语
1. 基矢 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 张开一个空间 L，荷载群 G 的一个表示 D.	1. 态 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 构成一个表象 $\{\psi_i\}$ 的基.
2. 群 G 的元素 R 和类算符 C_i 在	2. 算符 R 和 C_i 在表象 $\{\psi_i\}$ 中的矩

L 中的矩阵表示分别为[1] $D_{ab}(R)$ 和 $D_{ab}(C_i)$.	阵表示分别为[1] $\langle\psi_a\|R\|\psi_b\rangle=D_{ab}(R)$, $\langle\psi_a\|C_i\|\psi_b\rangle=D_{ab}(C_i)$.
3. 群 G 在空间 L 中的 CSCO.	3. 同左.
4. 群 G 的可约表示(不可约表示).	4. CSCO 的非对角表象(对角表象).
5. CSCO 的本征值标志不可约基.	5. CSCO 的本征值(量子数)标志量子态.
6. 群 G 的可约表示到不可约表示的约化.	6. CSCO 的非对角表象到对角表象的表象变换.

按照这一新的理论,我们就把群表示论的基本问题——如求特征标、不可约基、不可约矩阵元、CG 系数(Clebsch–Gordan)系数、母分系数(Fractional Parentage Coefficients)等等统统都归结为求相应空间的 CSCO 的本征值和本征函数问题,因此这套办法可称为*本征函数法*.

本征函数法的优点是易于程序化,我们用此法编制了计算置换群 CG 系数和外积约化系数的程序,首次计算了六个粒子以内的系数表(见《置换群约化系数及其应用》,1981,科学出版社出版). 解决了置换群传统表示论中的一个老大难问题. 此外还解决了一些物理、化学应用中迫切需要解决的置换群和高秩酉群表示论问题,如

1. 置换群非标准基到标准基之间的表象变换系数.
2. 构造任意 n 的 SU_n 群的 Gelfand 基.
3. Gelfand 表象下任意 n 的 SU_n 群 CG 系数.
4. n 为任意值的 SU_n 群拉卡系数和 9ν 系数.
5. 构造 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基的普适方法.
6. 计算 m, n 为任意数时的 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 母分系数.
7. 计算 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基到 SU_{m+n} Gelfand 基的表象变换矩阵.

本书是针对具有以下基础知识的读者写的:

1. 线性代数(如不变子空间,最小不变子空间,矩阵对角化,解线性齐次方程组,张量代数等等).
2. 量子力学表象理论(CSCO 概念,对角表象和非对角表象,表象变换等). 某些章节还需用到角动量理论基础.
3. 初步的群论基础

第 3 点并不是必需的. 本书所用到的群论和群表示论基础在第一、二章都作了交待. 为了节省篇幅,部分定理没有证明,而仅用例子作些说明. 这两章对学过一点群表示论的读者起复习和统一记号的作用,对新读者则起引路作用,使他们读本书时可以不必翻阅其它书籍. 如果读者感到过于简略,或者对略去的证明特别感兴趣,则可参阅 Hamermesh 的书.

由于群表示论的内容十分丰富,本书只能集中在与本征函数法有关的问题上,至于一些其它书上都能找到的内容则尽量少写.

---

1) 对非正交归一基,两者的定义是不一致的,见 § 2.11.

本书尽可能采用群表示论中的标准记号，因此读者在学了群表示论的新途径之后，再去看其它参考书或有关文献时，不会有任何困难．用“*”代表复数共轭，“～”代表转置，“†”代表厄密共轭．

为了避免一下就引入过多的新概念，打“*”号的小节初读时可以跳过去，等后面用到时再回过头来看．有些打“*”号的小节内容是较深的．

部分章节备有习题．文献按中、英、俄次序列于书末．正文中、英、俄文献只列出作者的姓及文献发表的年代．如所引的该作者同年发表的文献不止一篇，则按次序用 $a, b, c, d, \cdots$ 区分之．

第一章 群论基础

§1.1 群的定义

抽象群的定义：数学上把满足下列条件的元素集合 $a, b, c \cdots$（或用 $R_a, R_b, R_c, \cdots$ 或用 $R, S, T, \cdots$ 等代表）称为一个群 G：

首先在该元素集合中定义一种"乘法"规则，使得任意两个元素的'积' ab 有明确的定义，并满足以下四条

(1) 封闭性：若元素 a, b 属于这个集，则 ab 也属于这个集.

(2) 乘法满足结合律：即 $a(bc)=(ab)c$.

(3) 存在幺元素：该集合一定包含一个元素 e（或用 I 代表），称为幺元素或恒等元素，即对任何元素 a 都有 $ae=ea=a$.

(4) 存在逆元素：若元素 a 属于该集合，则集合中存在元素 b，满足 $ab=ba=e$. 元素 b 称为元素 a 的逆元素，并记为 $b=a^{-1}$.

阿贝尔群：若一个群的任意两个元素都满足 $ab=ba$，即'乘法'满足交换律（或者说任意两个元素都互相对易，$[a, b]=ab-ba=0$），则称它为阿贝尔群或可交换群.

有限群：若群元的个数是有限的，则称为有限群.

有限群的阶(order)：有限群 G 的群元个数称为它的阶，记为 g.

连续群：群元可用连续变化的参数来标志的群称为连续群，连续群的元素是不可数的，所以是无限群.

无限不连续群：群元个数为无限，但每个群元需用分立的指标标志，例如空间群.

以后我们有时就用元素集 $\{a\}$ 代表一个群 G，记为群 $\{a\}$. 用记号 $a\in G$ 代表 a 为群 G 的一个元素，即代表 a 属于群 G.

前面关于抽象群的定义是十分广泛的，两个群元的'乘积' ab 可以随便定义（见例 1）. 物理上主要感兴趣的也是本书要讨论的群是所谓变换群(group of transformations)或算符群(group of operators)，这时群元素 $R_a, R_b, R_c, \cdots$ 代表一组变换或操作(operation)，而两个操作的积 $R_bR_a=R_c$ 就定义为先进行操作 R_a，后进行操作 R_b 所对应的一个合操作.

对称群：一个物体或者说一个物理系统往往具有某种对称性，保持该系统不变的操作称为对称操作. 不难看出，所有这些对称操作的集合构成一个群 G，称为该系统的对称群. 显然系统的哈密顿 H 和群 G 的任一元素相对易. 记为

$$[H, G]=0. \tag{1-1}$$

例 1 所有的整数在算术加法运算下构成一个群.

例 2 n 个复数 $e^{2\pi il/n}$, $l=0, 1, \cdots, n-1$ 在算术乘法下构成一个群.

例 3 三维转动群 R_3.

对于一个球对称的物体或系统，例如原子，将它绕通过对称中心的任一轴 $\boldsymbol{n}(\theta', \varphi')$（$\theta'$, φ' 为 $\boldsymbol{n}$ 的方位角）转过任意角度 φ 它都保持不变. 对称操作可用记号

$$R_{n(\theta',\varphi')}(\varphi),\ 0\leqslant\theta'\leqslant\pi,\ 0\leqslant\varphi'\leqslant2\pi,\ 0\leqslant\varphi\leqslant\pi \tag{1-2a}$$

来标志. 这些操作的全体构成一个群 R_3, 称为三维转动群. 这里转动角 φ 限制为 0 到 π 的原因, 是由于绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转 $\pi+\varphi$ 角等价于绕负 $\boldsymbol{n}$ 轴转 $\pi-\varphi$ 角. 幺元素为 $R(0)$. 而 $R_{n(\theta',\varphi')}(\varphi)$ 的逆元素为

$$R^{-1}_{n(\theta',\varphi')}(\varphi)=R_{n(\pi-\theta',\pi+\varphi')}(\varphi). \tag{1-2b}$$

因为 θ'、φ' 和 φ 都可以连续变化, 所以 R_3 群是连续群. 由于两个转动操作不对易, 所以它是非阿贝尔群.

图 1.1-1 CO 分子

例 4 二维转动群 R_2.

线性分子[1] 如 CO, 绕其中心线 z 轴(见图 1.1-1)转过任意角度 φ 保持不变, 对称操作可记为

$$R_z(\varphi)\quad 0\leqslant\varphi\leqslant2\pi. \tag{1-2c}$$

它们构成一个群 R_2, 称为*二维转动群*, 它也是一个连续群. 显然

$$R_z(\varphi_1)R_z(\varphi_2)=R_z(\varphi_2)R_z(\varphi_1)=R_z(\varphi_1+\varphi_2),$$

因此 R_2 群是阿贝尔群.

例 5 空间反演群.

将空间一点 $P(x, y, z)$ 变到 $P'(-x, -y, -z)$ 的变换叫做*空间反演* I(inversion). (e, I) 构成的二阶群称为空间反演群 G_I 或 $\mathscr{C}_i$.

例 6 $\mathscr{C}_{3v}$ 群.

氨分子 NH_3 的三个氢原子处于等边三角形的三个顶点(见图 1.1-2a). 氮原子在三个氢原子的正上方, 图 1.1-2b 是氨分子的俯视图.

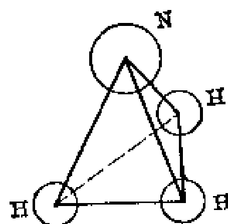


图 1.1-2a NH_3 分子, $\mathscr{C}_{3v}$ 群

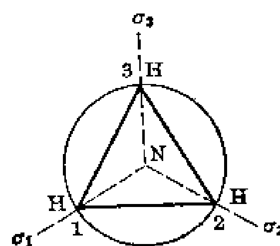


图 1.1-2b NH_3 分子俯视图

容易看到 NH_3 分子的对称操作共有 6 个

$$e,\ C_3,\ C_3^2,\ \sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3. \tag{1-3}$$

$C_3=R_z(120°)$, $C_3^2=R_z(240°)$, σ_i 为通过顶点 i 和 z 轴的反射面. 它们构成一个群, 称为 $\mathscr{C}_{3v}$ 群, 阶数为 6, 它是氨分子的对称群.

根据顶点 1, 2, 3 在操作(1-3)下的变换关系, 可得出 $\mathscr{C}_{3v}$ 群的乘法关系. 注意, 我们规定逆时针转动方向为正方向, 且反射面 σ_1, σ_2, σ_3 在空间为固定(即不随顶点而变). 例如:

---

1) 线性分子的对称群为 $\mathscr{C}_{\infty v}$ 群, 它的对称操作除 $R_z(\varphi)$ 外, 还有绕通过 z 轴的任一平面的反射(有无穷多个).

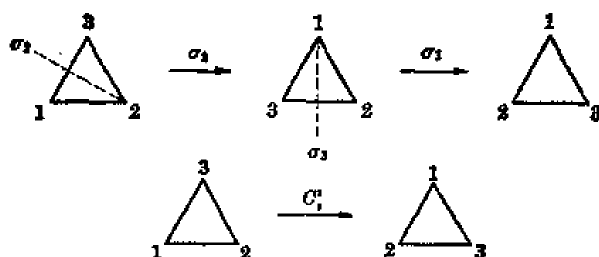


图 1.1-2c

由此可知，$\sigma_3\sigma_2=C_3^2$. $\mathscr{C}_{3v}$ 群群元的乘法关系列在表 1.1. 这种表称为群表.

表 1.1 $\mathscr{C}_{3v}$ 群表

ab (a \ b)	e	σ_3	σ_2	σ_1	C_3	C_3^2
e	e	σ_3	σ_2	σ_1	C_3	C_3^2
σ_3	σ_3	e	C_3^2	C_3	σ_1	σ_2
σ_2	σ_2	C_3	e	C_3^2	σ_3	σ_1
σ_1	σ_1	C_3^2	C_3	e	σ_2	σ_3
C_3	C_3	σ_2	σ_1	σ_3	C_3^2	e
C_3^2	C_3^2	σ_1	σ_3	σ_2	e	C_3

例 7 矩阵群: g 个非奇异矩阵按矩阵乘法构成一个群, 称为矩阵群. 例如以下三个 2 阶矩阵构成一个矩阵群.

$$e=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix},\quad A^2=\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix} \tag{1-4}$$

习　　题

1. 验证 $\mathscr{C}_{3v}$ 群乘法表 1.1.

2. 作出 $\mathscr{C}_{4v}$ 群的乘法表, $\mathscr{C}_{4v}$ 群由以下 8 个元素组成: e, C_4, C_4^2, C_4^3, σ_1, σ_2, σ_3, σ_4. 这里 $C_4=R_z(90°)$, σ_i 为反射面. 见图 1.1-3.

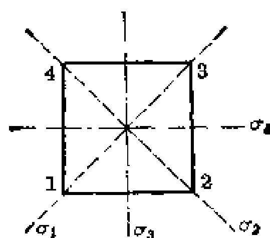


图 1.1-3 $\mathscr{C}_{4v}$ 群

§1.2 置 换 群 S_n

1 S_n 的定义:

描述由 n 个全同粒子组成的粒子体系时, 我们先把 n 个粒子的坐标编上号码1, 2, …n, 然后要求系统的总波函数对交换粒子的坐标编码具有一定的对称性, 用记号

$$\begin{pmatrix}1, & 2, & \cdots n\\ p_1, & p_2, & \cdots p_n\end{pmatrix}\equiv\begin{pmatrix}i\\ p_i\end{pmatrix} \tag{1-5}$$

代表编码的一个置换，它把 1 换到 p_1，2 换到 p_2，$\cdots n$ 换到 p_n，显然这种置换一共有 $n!$ 个。定义两个置换 R_1，R_2 的积 R_1R_2 是另一个置换，它是先施行置换 R_2 再施行置换 R_1 的结果，例如

$$R_1=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix},\quad R_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix},$$

$$R_1R_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix},$$

$$R_2R_1=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}.$$

所以 $[R_1, R_2]=R_1R_2-R_2R_1\neq 0$。容易看出

$[R_1, R_2]=0$，若 R_1 和 R_2 不涉及同一个指标的置换。

$[R_1, R_2]\neq 0$，若 R_1 和 R_2 涉及同一指标的置换。

同一个置换可以有多种写法，例如

$$\begin{pmatrix}1&2&3\\p_1&p_2&p_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&3\\p_2&p_1&p_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}3&2&1\\p_3&p_2&p_1\end{pmatrix}=\cdots$$

显然 $\begin{pmatrix}i\\p_i\end{pmatrix}$ 的逆置换为 $\begin{pmatrix}p_i\\i\end{pmatrix}$。所有 $n!$ 个置换构成一个群，称为*置换群*，记为 S_n，有的书上也称它为*对称群*(symmetric group)。例如 S_3 群由以下 6 个置换构成

$$\begin{aligned}R_1=e=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix},\quad R_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix},\quad R_3=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix},\\ R_4=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix},\quad R_5=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix},\quad R_6=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{1-6}$$

2　置换用轮换(cycle)和对换(transposition)表达

我们可用更简洁的方法来表达一个置换，即将一个置换用数字不重复的轮换(或称为循环置换)的积来表示

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7&8\\4&3&7&1&5&8&2&6\end{pmatrix}=(14)(237)(5)(68). \tag{1-7}$$

这里(5)称为单循环，代表 5 变到 5，即 5 不变；(14)为二循环，它把 1 变到 4，4 变到 1；(237)为三循环，它把 2 变到 3，3 变到 7，7 又变回到 2。类似地 $(p_1p_2\cdots p_k)$ 称为 k 循环，k 称为循环长度。

注意　1．这里各轮换中没有公共的数字，因此它们互相对易，如

$$(14)(237)=(237)(14).$$

因此(1-7)式中各轮换之间的次序是无关紧要的。

2．单循环可以省去不写．因此 S_8 的一个置换(1-7)式可写成(237)(14)(68)。

3．轮换可以有多种写法，如

$$(\alpha\beta\gamma\delta)=(\beta\gamma\delta\alpha)=(\gamma\delta\alpha\beta)=(\delta\alpha\beta\gamma).$$

二循环又称为对换(transposition)．相邻两个数的对换$(i,\ i+1)$称为相邻对换(或相邻置换)．

利用以下递推关系，可将任一对换表为相邻对换的积：

$$(i,\ i+v)=(i+1,\ i+v)(i,\ i+1)(i+1,\ i+v). \tag{1-8a}$$

例 S_4 群

令(1-8a)式中 $v=2$ 得

$$(13)=(23)(12)(23),\quad (24)=(34)(23)(34). \tag{1-8b}$$

令(1-8a)式中 $v=3$，并利用上式得

$$(14)=(24)(12)(24)=(34)(23)(34)(12)(34)(23)(34). \tag{1-8c}$$

容易证明以下公式

1．$(\alpha\beta\gamma\delta\epsilon)=(\alpha\beta)(\beta\gamma\delta\epsilon)=(\alpha\beta\gamma)(\gamma\delta\epsilon)=(\alpha\beta\gamma\delta)(\delta\epsilon)$

$$=(\alpha\beta)(\beta\gamma)(\gamma\delta)(\delta\epsilon). \tag{1-9a}$$

2．$(\alpha\beta\gamma\delta\epsilon)=(\alpha\epsilon)(\alpha\beta\gamma\delta)=(\alpha\delta\epsilon)(\alpha\beta\gamma)=(\alpha\gamma\delta\epsilon)(\alpha\beta)$

$$=(\alpha\epsilon)(\alpha\delta)(\alpha\gamma)(\alpha\beta). \tag{1-9b}$$

3．$(\alpha\beta\gamma\delta\epsilon)^{-1}=(\alpha\epsilon\delta\gamma\beta)=(\epsilon\delta\gamma\beta\alpha).$ (1-10)

由此可见，任一 $k(k>2)$ 循环均可表为对换的积．

注意不要把(1-9)式和(1-7)式相混．(1-7)式中各轮换之间没有公共数字，而(1-9)式中任意相邻的两个对换必有一个公共数字，因此(1-9)式中各对换之间的次序是十分重要的，不能任意交换．

置换群生成元：由于任一个置换可表为轮换之积，轮换又可表为对换之积，对换又可表为相邻对换之积，因此任一置换可表为相邻对换之积，于是 $n-1$ 个相邻对换 $(i,\ i+1)$，$i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1$ 称为 S_n 群的生成元．

循环群：令 $a=(p_1p_2\cdots p_k)$ 为一 k 循环，显然 $a,\ a^2,\ \cdots,\ a^{k-1},\ a^k=e$ 构成一个 k 阶阿贝尔群，称为循环群．

置换宇称：前面说过一个置换可分解成 N 个对换的积，但这种分解的方式不唯一，因此数目 N 也随之不同，可以证明 N 虽然可变，但 N 的奇偶性不变，要么永为奇数，要么永为偶数，因此对任一置换 P 可定义一个置换宇称

$$\delta_P=(-1)^N. \tag{1-11}$$

$\delta_P=1(-1)$的置换称为偶(奇)置换．显然，一个奇置换和一个偶置换的积为奇置换，两个奇(或偶)置换之积为偶置换．如果 $p=p_1p_2$，则 $\delta_p=\delta_{p_1}\delta_{p_2}$．

由(1-9)式可知，一个 k 循环$(p_1p_2\cdots p_k)$的置换宇称为$(-1)^{k-1}$．

例 S_3 群的六个元素(1-6)式用轮换形式可表为

$$\begin{aligned}&R_1=e, && R_2=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix}=(12), && R_3=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}=(13)\\ &R_4=\begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix}=(23), && R_5=\begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}=(123), && R_6=\begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix}=(132).\end{aligned} \tag{1-12}$$

其中 e，(123)，(132)为偶置换，(12)，(13)，(23)为奇置换．容易作出 S_3 群的乘法表1.2(表中每个元素右下角的数字是该元素所对应的编号)．

表 1.2 S_3 群表

$a=cb$ (c \ b)	e_1	$(12)_2$	$(13)_3$	$(23)_4$	$(123)_5$	$(132)_6$
e_1	e_1	$(12)_2$	$(13)_3$	$(23)_4$	$(123)_5$	$(132)_6$
$(12)_2$	$(12)_2$	e_1	$(132)_6$	$(123)_5$	$(23)_4$	$(13)_3$
$(13)_3$	$(13)_3$	$(123)_5$	e_1	$(132)_6$	$(12)_2$	$(23)_4$
$(23)_4$	$(23)_4$	$(132)_6$	$(123)_5$	e_1	$(13)_3$	$(12)_2$
$(123)_5$	$(123)_5$	$(13)_3$	$(23)_4$	$(12)_2$	$(132)_6$	e_1
$(132)_6$	$(132)_6$	$(23)_4$	$(12)_2$	$(13)_3$	e_1	$(123)_5$

习　　题

1. 验证 S_3 群群表 1.2.

§1.3 子　　群

定义　如果群 G 的元素集合中有一个子集，按照群 G 本身乘法规则也构成一个群 G_s，则称它为群 G 的**子群**. 用 $G\supset G_s$ 表示群 G 和其子群 G_s 的隶属关系.

子群 G_s 还可能包含子群 $G_{s'}$ 等等，这样子群套子群就构成一个群链(group chain)

$$G\supset G_s\supset G_{s'}\supset\cdots$$

例 1　二维转动群 R_2 为三维转动群 R_3 的一个子群.

例 2　$\mathscr{C}_{3v}$ 群中，e, C_3, C_3^2 三个群元构成一个群，称为 $\mathscr{C}_3$ 群，而 $(e,\ \sigma_1)$，$(e,\ \sigma_2)$，$(e,\ \sigma_3)$ 分别构成三个子群 $\mathscr{C}_{s_1}$，$\mathscr{C}_{s_2}$，$\mathscr{C}_{s_3}$. 因此 $\mathscr{C}_{3v}$ 有四种群链

$$\mathscr{C}_{3v}\supset\mathscr{C}_3,\quad \mathscr{C}_{3v}\supset C_{s_i},\quad i=1,\ 2,\ 3.$$

例 3　置换群的子群.

S_4 群共有 $4!=24$ 个元素. 将涉及 4 的置换全去掉，剩下的 6 个元素显然构成 S_3 群，再把涉及 3 的置换全去掉，剩下 2 个元素构成 S_2 群，因此有一群链 $S_4\supset S_3\supset S_2$.

在 S_4 群的 24 个元素中，我们也可将涉及其它数，例如 3 去掉，剩下的 6 个元素构成一个群 $S_3(124)$，这里记号 S_3 后面数字代表它是数字 1, 2, 4 之间的置换，以区别子群 $S_3\equiv S_3(123)$，后者是数字 1, 2, 3 之间的置换. 同样 $S_3(134)$，$S_3(234)$ 也是 S_4 的子群.

S_4 还有很多子群，例如有以下二个四阶阿贝尔群：

四群(four-group)：e，$(12)(34)$，$(13)(24)$，$(23)(14)$.　　(1-13)

循环群：e，(1234)，$(1234)^2(=(13)(24))$，$(1234)^3(=(1432))$.　　(1-14)

类似地对 S_n 群有群链 $S_n\supset S_{n-1}\supset S_{n-2}\supset\cdots\supset S_2$ 等等

交替群(alternative group) S_n 群中所有的偶置换构成一个子群 $\mathscr{A}_n$ 称为交替群.

习　　题

1. 构造四群的群表.

§1.4 同构和准同构(同态)

同构(isomorphic)：如果两个群 G 和 G' 的元素一一对应，且乘积关系也一一对应，即

若对应于 $ab=c$ 必有 $a'b'=c'$，那么我们说 G 和 G' 同构，记为 $G\approx G'$。

反同构：如果两个群 G 和 G' 的元素一一对应，且对应于 $ab=c$ 有 $b'a'=c'$，则称 G 和 G' 反同构.

若 $ab=c$，则 $b^{-1}a^{-1}=c^{-1}$，因此若令 $R_a=a^{-1}$，…，则由集合 $\{R_a\}$ 构成的群 $\widetilde{G}$ 和 G' 同构. 群 $\widetilde{G}$ 和 G 的差别仅在于元素的重新编号.

从抽象群角度讲，同构（或反同构）的群是一样的，但具体的算符群可能有很大的差别.

例 1 从表 1.1 和表 1.2 看到，$\mathscr{C}_{3v}$ 和 S_3 同构，元素间的对应关系为

$$\begin{array}{cccccc} e, & C_3, & C_3^2, & \sigma_1, & \sigma_2, & \sigma_3, \\ e, & (123), & (132), & (23), & (13), & (12). \end{array} \tag{1-15}$$

这种同构关系其实不必利用群表而直接按以下方式建立：

将三角形顶点按选定的方式编上号，如取图 1.1-2c 中的编号 $\underset{1\quad 2}{\overset{3}{\triangle}}$，我们称它为原始图形. 在群操作下，这些顶点互换位置. 我们就用在群操作下原始图形顶点的变换关系来代表该群操作. 例如在 C_3 作用下（逆时针转 120°）

$$\underset{1\quad 2}{\overset{3}{\triangle}} \xrightarrow{C_3} \underset{3\quad 1}{\overset{2}{\triangle}}, \quad C_3 \leftrightarrow (123)$$

C_3 和置换 (123) 相对应，这里置换 (123) 的意义是经 C_3 操作后，顶点 1 跑到了原来 2 所在的位置. 顶点 2 跑到了原来 3 所在的位置等.

利用以上方法可很快找到 $\mathscr{C}_{3v}$ 和 S_3 群的同构关系 (1-15). 这种方法也适用于找其它几何体的对称群和置换群或置换群的子群的同构关系（见 (3-21) 式，表 8.2-2 和表 8.2-3 等）.

还要注意的一点是操作 C_3 的效果等于将顶点 1 换到原来 2 所在的位置…，顶点 2 换到原来 3 所在的位置等，这仅仅是对 C_3 作用在原始图形才对的. 例如若原始图形先经过 σ_1 操作，再经过 C_3 操作，其结果为

$$\underset{1\quad 2}{\overset{3}{\triangle}} \xrightarrow{\sigma_1} \underset{1\quad 3}{\overset{2}{\triangle}} \xrightarrow{C_3} \underset{2\quad 1}{\overset{3}{\triangle}}$$

可以看到，这里 C_3 对第二个三角形的作用效果却是把顶点 1 换到了原来 3 所在的位置，2 换到了原来 1 所在的位置等. 总之，在讨论同构关系时，C_3 总是对应于置换算符 (123)，如 C_3 和 σ_1 的积为 $C_3\sigma_1=(123)(23)=(12)=\sigma_3$，而在讨论 C_3 对某个图形的作用时，C_3 总是把图形绕逆时针方向转 120°.

例 2 S_4 群的子群 $S_3(124)$，$S_3(134)$，$S_3(234)$ 都和 $S_3\equiv S_3(123)$ 同构.

Cayley 定理 任何一个阶为 n 的有限群，都和置换群 S_n 的某一子群同构.

我们不去证明这个定理，在第八章我们将介绍一个方法，用这个方法可方便地找出和点群同构的置换群的子群. 例 1 中 $\mathscr{C}_{3v}$ 和 S_3 同构是这定理的一个特例.

准同构 (homomorphic)：若群 G 的每一个元素 a 都对应于群 G' 的一个元素 a'，但 a' 可能对应于群 G 的不止一个元素，且若对应于 $ab=c$ 有 $a'b'=c'$，则称 G' 准同构（或者说同态）于 G.

同构是准同构的特例.

任何一个群都有一个最简单的准同构映象，那就是让群的每个元素都对应于一个幺元素.

例如 S_2 群准同构于 $\mathscr{C}_{3v}$，元素的对应关系为

$$e,\ C_3,\ C_3^2 \to e;\qquad \sigma_1,\ \sigma_2,\ \sigma_3 \to (12). \tag{1-16}$$

§1.5 共轭元素类

如果群 G 中能找到一个元素 u, 使得

$$b = uau^{-1}, \tag{1-17}$$

则称元素 b 为 a 的共轭. (1-17)式称为用 u 对 a 进行共轭运算. 上式左乘 u^{-1}, 右乘 u, 可得到 $a=u^{-1}bu$, 即 a 为 b 的共轭, 因此共轭是相互的. 显然一个元素和其自身共轭. 不难证明如果 a 和 b 共轭, b 和 c 共轭, 则 a 和 c 也共轭.

一个群中相互共轭的元素构成一个共轭元素类, 或简称一个**类**. 群 G 的每一元素分属于某一个类. 我们用 N 记群 G 所含的类的个数, 它是群 G 的一个重要特征; 用 g_i 记第 i 类中所包含的群元个数, 显然 $g=\sum\limits_{i=1}^{N} g_i$.

如何找一个群的类呢? 把群表(如表 1.2)中的 b 列左乘 R_b^{-1}, $b=1, 2, \cdots g$, 我们就得到一个新的表, 此表中的同一行的元素必属于同一类, 这样很容易一下子就找到群 G 所有的类, 从而把群 G 的元素完全按 N 个类进行分解, $G=C_1\oplus C_2\oplus\cdots\oplus C_N$. 这里$\oplus$代表集合和.

习　　题

1. 按上述方法将置换群 S_3 的元素按类进行分解.

ambivalent 类: 若群 G 的一个类中同时包含元素 a, b, …及其逆元素 a^{-1}, b^{-1}, …, 则称它为 ambivalent 类, 否则称为非 ambivalent 类. 非 ambivalent 类中 a 和 a^{-1} 必属于不同的类.

由类的定义立即可知:

(1) 任一群的幺元素自成一类: $e=aea^{-1}$.

(2) 阿贝尔群中每个元素自成一类:

$$a=uau^{-1}=uu^{-1}a.$$

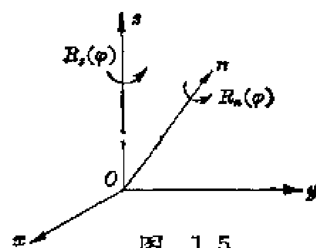


图 1.5

例 1 R_3 群.

设有两个转动: 绕 z 轴转 φ 角和绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转 φ 角(见图 1.5). 这两个转动操作的关系为

$$R_n(\varphi)=R(z\to n)R_z(\varphi)R^{-1}(z\to \boldsymbol{n}). \tag{1-18}$$

这里 $R(z\to\boldsymbol{n})$代表将 z 轴转到 $\boldsymbol{n}$ 轴的一个转动, 其逆转动 $R^{-1}(z\to\boldsymbol{n})$则把 $\boldsymbol{n}$ 轴转回 z 轴. (1-18)式的几何意义是绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转 φ 角可分三步走: (1) 把 $\boldsymbol{n}$ 轴转到 z 轴. (2) 绕 z 轴转 φ 角. (3) 再把 z 轴转回到 $\boldsymbol{n}$ 轴. (1-18)式表明, 绕空间任意轴转过同样角度 φ 的转动属于同一个类. 由于 $R_n^{-1}(\varphi)=R_{-n}(\varphi)$, 因此 R_3 群所有的类都为 ambivalent 类.

例 2 $\mathscr{C}_{3v}$ 群共有三个 ambivalent 类.

$$e,\ (C_3,\ C_3^2),\ (\sigma_{v_1},\ \sigma_{v_2},\ \sigma_{v_3}).$$

例 3 置换群的类.

若置换 a 写成轮换的形式, 例如 $a=(ij)$, 令 $p=\begin{pmatrix} i \\ p_i \end{pmatrix}$, 于是 $p^{-1}=\begin{pmatrix} p_i \\ i \end{pmatrix}$. 容易看到和 a

相共轭的元素 b 为

$$b=pap^{-1}=p(ij)p^{-1}=(p_ip_j)$$

因为 pap^{-1} 代表置换 $p_i\to i\to j\to p_j$，它等价于 $p_i\leftrightarrow p_j$。类似地可得到

$$p(ij)(klm\cdots)p^{-1}=p(ij)p^{-1}p(klm\cdots)p^{-1}=(p_ip_j)(p_kp_lp_m\cdots)。\qquad(1\text{-}19)$$

例如
$$a=(12)(345),\quad p=\begin{pmatrix}1&3&5\\3&5&1\end{pmatrix}=(135)。$$

将 a 中的数学进行 p 所指定的置换 $(1\to3\to5\to1)$ 得

$$pap^{-1}=(32)(541)=(23)(154)。$$

前面说过，把一个置换表成轮换的积时，各轮换因子的次序是任意的，我们总可把轮换因子按轮换长度由长到短排列，假定最长的一个为 i_1 循环，其次为 i_2 循环 $(i_1\geqslant i_2)$，…等等。因此可用 $(i_1i_2\cdots i_n)$ 标志一个置换的*循环结构*。显然 $n=i_1+i_2+\cdots+i_n$。例如(1-7)式的置换(237)(14)(68)(5)的循环结构为 $(3221)\equiv(32^21)$。

由(1-19)式可知，置换群的共轭元素具有相同的循环结构，反之亦然。因此同一类元素有相同的置换字称。根据循环结构很容易写出置换群的共轭元素类。例如

S_3 群，共有 $N=3$ 个类

1．$(111)=(1^3)$，$g_1=1$：e。
2．(21)，　　$g_2=3$：(12)，(23)，(13)。　　(1-20)
3．(3)，　　$g_3=2$：(123)，(132)。

S_4 群，共有 $N=5$ 个类

1．(1^4)，　$g_1=1$：e。
2．(21^2)，　$g_2=6$：(12)，(13)，(14)，(23)，(24)，(34)。　　(1-21)
3．(31)，　$g_3=8$：(123)，(132)，(124)，(142)，(134)，(143)，(234)，(243)。
4．(4)，　$g_4=6$：(1234)，(1243)，(1324)，(1342)，(1423)，(1432)。
5．(2^2)　$g_5=3$：(12)(34)，(13)(24)，(14)(23)。

由(1-10)式可见，置换 a 和 a^{-1} 具有相同的循环结构，因此必属同一类，也就是说 S_n 群的类全为 ambivalent 类。

注意，原来在群 G 中属于同一类的元素，在 G 的子群中它们可以属于不同的类。例如在 S_4 群中，(12)(34)，(13)(24)，(14)(23)属于同一类，而在 S_4 的子群——四群(1-13)式中，它们各自成一类(四群为阿贝尔群)，因为这时在四群中找不到一个元素 u 使得 $(12)(34)=u(13)(24)u^{-1}$ 等，而 S_4 群中存在元素 $u=(23)$ 满足 $(12)(34)=u(13)(24)u^{-1}$，使得(12)(34)和(13)(24)互为共轭。

下面讨论 S_n 群同一类中所包含的元素个数，为此把循环结构表成以下形式

$$\underbrace{(\cdot)\cdots(\cdot)}_{f_1}\quad\underbrace{(\cdot\cdot)\cdots(\cdot\cdot)}_{f_2}\quad\underbrace{(\cdot\cdot\cdot)\cdots(\cdot\cdot\cdot)}_{f_3}\cdots$$

即有 f_1 个单循环，f_2 个二循环，…，f_n 个 n 循环，$n=\sum\limits_{k=1}^{n}kf_k$，则容易证明(Hamermesh)，具有这种循环结构的置换数目(即该类所包含的元素数目)

$$g_{(f_1f_2\cdots)}=\frac{n!}{f_1!\,f_2!\cdots f_n!\,2^{f_2}3^{f_3}\cdots n^{f_n}}\qquad(1\text{-}22)$$

例如：令 $f_1=n-k$, $f_k=1$, 其余的 $f_i=0$, 由(1-22)式立即可得 k 循环类的元素数

$$g_{(k)}=\frac{n!}{(n-k)!k}=\binom{n}{k}(k-1)! \tag{1-23}$$

$\binom{n}{k}$ 代表二项式系数．上式还可帮助我们写下 S_n 群的所有 k 循环置换．例如求 S_4 群 3 循环，首先从 4 个数 1, 2, 3, 4 中选出 3 个正序数 (ijk), $i<j<k$, 共有 $\binom{n}{k}=\binom{4}{3}=4$ 种，即 (123), (124), (134), (234)．然后固定第 1 个数，置换后面 $(k-1)!=2$ 个数，即得到所有八个 3 循环置换（见(1-21)式）．

习　　题

1．计算 S_4, S_5 群各个类所包含的元素数．

2．找出 $\mathscr{C}_{4v}$ 群的类．

§1.6　陪集，Lagrange 定理*

如果 G_s 是 G 的子群，我们用 $H_1(=e)$, H_2, …, H_h 表示 G_s 的元素，显然 $h<g$, 否则子群 G_s 就是群 G 本身了．我们在群 G 中找出一个不属于 G_s 的元素 a, 作出所有的乘积 aH_1, aH_2, …, aH_h. 容易证明，这样作出的 h 个元素互不相同，和 G_s 中的元素也不相同．因为如果 $aH_i=aH_j$, 则意味着 $H_i=H_j$; 如果 $aH_i=H_j$, 则 $a=H_jH_i^{-1}$, 意味着 $a\in G_s$, 而这些都是不可能的．我们把这样作出的 h 个元素集合用符号 aG_s 表示，并称 aG_s 为 G_s 的左陪集．如果 G_s 和 aG_s 还未穷尽群 G 的元素，我们再在群 G 中找一个既不属于 G_s 也不属于 aG_s 的元素 b, 作出集合 bG_s. 这些元素既不同于 G_s 中的元素，也不同于 aG_s 中的元素．最后我们把 G 的元素分成若干个集合 G_s, aG_s, bG_s, …, 我们用符号

$$G=G_s\oplus aG_s\oplus bG_s\oplus\cdots\oplus dG_s \text{[1]} \tag{1-24}$$

表示这种分解，称为群 G 元素按 G_s 的左陪集分解．元素 e, a, b, …, d 称为群 G 的陪集代表(coset representative)．对于一定的 G_s, 这种分解是唯一的，也就是说 a 可以是 aG_s 中的任一个元素，b 可以是 bG_s 中的任一个元素，…．例如任选一个 $a_k=aH_k$, 作出陪集 a_kG_s, 则 a_kG_s 和 aG_s 相重合，只是元素的次序有变动而已，因为

$$a_kH_i=aH_kH_i=aH_{ki}.$$

因此陪集 aG_s 中的任一个元素都可选为陪集代表．

同样，我们也可作出 G 的右陪集分解

$$G=G_s\oplus G_sa'\oplus G_sb'\oplus\cdots \tag{1-25}$$

由此得到群 G 的阶 g 必为其子群的阶 h 的整数倍

$$g=mh \quad 或 \quad h=g/m. \tag{1-26}$$

m 为整数，此即为 Lagrange 定理．

由此可知，若群 G 的左陪集分解共分成 m 个陪集，则其右陪集分解也分成 m 个陪集．

例　令 $G=S_3$, $G_s=S_2$

1) 加号⊕代表和集记号 ∪，两个集 A 和 B 的和集 $A\cup B$ 是指由 A 及 B 的元素全体所构成的集合．

左陪集分解：

$$S_3=S_2\oplus(13)S_2\oplus(23)S_2=S_2\oplus(123)S_2\oplus(132)S_2$$
$$=(e,\ (12))\oplus((13),\ (123))\oplus((23)+(132))$$

左陪集代表为 e, (13)或(123), (23)或(132).

右陪集分解：

$$S_3=S_2\oplus S_2(13)\oplus S_2(23)=(e,\ (12))\oplus((13),\ (132))\oplus((23),\ (123)).$$]

§1.7 不变子群，商群*

不变子群：若 G_s 为 G 的子群，且 G_s 跟群 G 任一元素 a 构成的左陪集和右陪集都相重合，记为

$$aG_s=G_sa,\quad a\in G, \tag{1-27}$$

则称 G_s 为 G 的不变子群.

不变子群的另一等价定义是：若 $H_1(=e)$, H_2, $\cdots$, H_h 为 G_s 的元素，且

$$aH_ia^{-1}\in G_s\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ h,\quad a\in G, \tag{1-28}$$

则称 G_s 为不变子群.

由(1-28)式可知，G 的不变子群要末包含 G 的某一类的所有元素，要末不包含某一类的任一元素. 反之亦然，如 G 的某一子群 G_s 由 G 的某些整类组成，则 G_s 为 G 的不变子群. 因此一个阿贝尔群的所有子群都为不变子群.

单纯群：如果群 G 不包含不变子群，则称它为*单纯群*.

半纯群：如果群 G 不包含阿贝尔不变子群，则称它为*半纯群*，否则称为*非半纯群*.

区分单纯群、半纯群和非半纯群对李群是十分重要的，对有限群则并不重要.

例 1 转动群 R_3 为单纯群(详见第六章).

例 2 S_3 群为非半纯群. 因为 S_3 的一个阿贝尔子群 $\mathscr{A}_3=(e,\ (123),\ (132))$ 包含 S_3 的二个整类，所以 $\mathscr{A}_3$ 是 S_3 的不变子群. 因此 S_3 为非半纯群. 显然 $\mathscr{A}_3$ 本身为单纯群.

例 3 S_4 群为非半纯群. 因为 S_4 的一个阿贝尔子群——四群$(e,\ (12)(34),\ (13)(24),\ (14)(23))$包含 S_4 的二个整类，所以四群是 S_4 的不变子群.

商群

若群 G 有一不变子群 G_s，根据前面讨论，群 G 的所有元素可分成 m 个组或 m 个集合，即子群 G_s 及其 $m-1$ 个陪集

$$G_s,\ a_2G_s,\ a_3G_s,\ \cdots,\ a_mG_s. \tag{1-29}$$

现在把每一个集合看成一单个'元素'，并定义两个集合 A 和 B 的'乘积' AB 为 A 中每一个元素和 B 中每个元素按群的乘法相乘所得的所有互不相同的元素所构成的另一个集合 C. 不难证明，在上述'乘积'定义下，m 个集合构成一个 m 阶的群，称为*商群*(factor group)，并用记号 G/G_s 代表商群.

例 S_3 群的不变子群 $\mathscr{A}_3=(e,\ (123),\ (132))$ 和它的陪集 $\mathscr{B}=((12),\ (13),\ (23))$ 构成 2 阶商群，容易验证

$$\mathscr{A}_3\mathscr{A}_3=\mathscr{A}_3 \quad \mathscr{B}\mathscr{B}=\mathscr{A}_3 \quad \mathscr{B}\mathscr{A}_3=\mathscr{A}_3\mathscr{B}=\mathscr{B}.$$

因此它和 S_2 群同构. $\mathscr{A}_3\approx e$, $\mathscr{B}\approx(12)$.

习　　题

1. 令 $A_1=G_s=(e,\ (13)(24),\ (14)(23),\ (12)(34))$, $A_2=(13)G_s$, $A_3=(14)G_s$, $A_4=(12)G_s$, $A_5=(123)G_s$, $A_6=(132)G_s$, 验证 $A_1, A_2, \cdots, A_6$ 构成商群且和 S_3 群(1-12)式同构.

§1.8 群的直积(direct product),同态核*

1. 若 G_1 和 G_2 为群 G 的两个互相对易的子群,阶数分别为 h_1 和 h_2, 即

$$[H_i^{(1)},\ H_j^{(2)}]=0,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ h_1,\ j=1,\ 2,\ \cdots h_2;\ H_i^{(1)}\in G_1, H_j^{(2)}\in G_2.$$

则按群 G 乘法得到的 h_1h_2 个元素 $\{H_i^{(1)}H_j^{(2)}\}$ 也构成一个群, 称为 G_1 和 G_2 的直积, 记为 $G_1\times G_2$. 显然 $G_1\times G_2$ 和 $G_2\times G_1$ 相同. $G_1\times G_2$ 也是 G 的一个子群, $G\supset G_1\times G_2$. 容易证明 G_1 和 G_2 都是乘积群 $G_1\times G_2$ 的不变子群.

例 1　考虑 6 阶循环群($a^6=e$). 它的两个子群为

$$G_1{:}e,\ a^2,\ a^4;\ G_2{:}e,\ a^3$$

于是 $G=G_1\times G_2$. 注意在此特例下, $G_1\times G_2$ 就是群 G 本身而不是它的一个子群.

例 2　$S_n(n=n_1+n_2)$ 有两个子群, $S_{n_1}(1,\ 2,\ \cdots n_1)$ 和 $S_{n_2}(n_1+1,\ \cdots,\ n)$ 它们互相对易, 它们的直接乘积群(阶数为 $n_1!n_2!$)$S_{n_1}\times S_{n_2}$ 为 $S_{n_1+n_2}$ 的子群, 所以有 $S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\times S_{n_2}$ (第四章中用记号 $S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 表之). 例如 $S_2(12)\times S_2(34)=(e,\ (12),\ (34),\ (12)(34))$.

例 3　三维转动群 R_3 和空间反演群 G_I(见 §1.1)对易. R_3 和 G_I 的直积叫做三维正交群, 记为 O_3

$$O_3=R_3\times G_I$$

2. 若有作用在不同空间的两个群 $G=\{a\}$ 和 $G'=\{a'\}$, 阶数分别为 h 和 h', 这两个群当然互相对易, 则所有的 hh' 个元素对(pair)$(a,\ a')$(或直接写成 aa'), $a\in G$, $a'\in G'$, 按乘法

$$(a,\ a')(b,\ b')=(ab,\ a'b')$$

(或写成 $(aa')(bb')=(ab)(a'b')$)构成一个阶数为 hh' 的群 $G\times G'$, 也称为 G 和 G' 的直积.

同态核　若群 $G=\{a\}$ 和 $G'=\{a'\}$ 准同构, $G\to G'$, 则与 G' 中单位元素 e' 相对应的 G 中的元素集合 H 称为同态核.

例如 S_n 和 S_2 准同构, $S_n\to S_2$, 让 S_n 中所有的偶置换 $\mathscr{A}_n$ 映射为 S_2 中的 e, 所有奇置换映射为 S_2 的(12), $\mathscr{A}_n$ 就是同态核.

下面证明

(1) 同态核 H 是一个不变子群.

(2) 商群 G/H 和 G' 同构.

首先 $e\in H$, 其次若 $a\to e'$, $b\to e'$, 则 $ab\to e'$, 此外由于 $aa^{-1}=e\to e'$, 因此若 $a\to e'$, 则 $a^{-1}\to e'$, 因此 H 构成一子群.

H 既然是一个子群, $H=G_s$ 就把 G 分成若干个陪集(1-24)式, 不同的陪集映射为 G'

中不同的元素. $H_s \to e'$, $aH_s \to a'e' = a'$, $H_sa \to e'a' = a'$, 这说明左陪集 aH 和右陪集 Ha 重合,因此 H 为一不变子群. 而商群 G/H 显然和群 G' 同构. 当同态核 H 只包含幺元素 e 时, G 和 G' 同构.

例如前面例子中,同态核构成交替群 $\mathscr{A}_n$, 它是 S_n 的不变子群,商群 $S_n/\mathscr{A}_n$ 和 S_2 同构. 又如 S_4 和 S_3 准同构, 同态核为 $H = (e, (12)(34), (13)(24), (23)(14))$, 它是 S_4 的不变子群. 商群 S_4/H 和 S_3 同构(见 § 1.7 习题).

第二章　群表示基础

§2.1　线性矢量空间

1. 线性空间的定义

普通的三维矢量空间是大家所熟悉的，现在需要将此直观概念进一步推广．考虑由元素 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\cdots$ 组成的一个集合 L，如果在此集合中我们定义了一个复数 α 和元素的“乘法” $\alpha\boldsymbol{x}$ 以及两个元素的“加法” $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$，并且满足

a．若 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\in L$，则 $\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y}\in L$．

b．$(\alpha+\beta)\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{x}$．

c．$(\alpha\beta)\boldsymbol{x}=\alpha(\beta\boldsymbol{x})$．　　(2-1)

d．$1\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$．

e．$\alpha(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})=\alpha\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{y}$．

f．L 包含零元素记为 0，$\boldsymbol{x}+0=\boldsymbol{x}$，对任意 $\boldsymbol{x}\in L$，

则称此集合 L 为一线性矢量空间．$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\cdots$ 称为矢量．

注意　$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, $\cdots$ 可以不局限于普通意义下的矢量，例如所有的 $n\times n$（即 n 行 n 列）矩阵构成一个 n^2 维线性矢量空间，这时 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ 代表矩阵，其分量就是矩阵元 x_{ij} 和 y_{ij}, $\alpha\boldsymbol{x}$ 的矩阵元为 αx_{ij}, $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$ 的矩阵元为 $x_{ij}+y_{ij}$，零“矢量”为零矩阵（n^2 个矩阵元全为零）．下面看到，$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ 还可以是群 G 的元素 R_a, R_b, $\cdots$．

关于矢量线性相关的定义和平常一样，不再赘述．

n 个线性独立的矢量 $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$, $\cdots$, $\boldsymbol{u}_n$ 构成 n 维矢量空间 L_n 的一组基矢，L_n 中任一矢量 $\boldsymbol{x}$ 均可表为基矢的线性组合

$$\boldsymbol{x}=\sum_i x_i\boldsymbol{u}_i. \tag{2-2}$$

$x_1\cdots x_n$ 称为矢量 $\boldsymbol{x}$ 在基 $\boldsymbol{u}_1\cdots\boldsymbol{u}_n$（即坐标系）上的坐标．

$\boldsymbol{u}_1\cdots\boldsymbol{u}_n$ 可以是量子力学中的 n 个态矢量 $|\varphi_1\rangle\cdots|\varphi_n\rangle$，它们构成一个完备系，任一态矢量 $|\psi\rangle$ 可用它来展开

$$|\psi\rangle=\sum_i a_i|\varphi_i\rangle. \tag{2-3}$$

对 $n\times n$ 矩阵空间（它为 n^2 维线性空间），基矢 $\boldsymbol{u}_i$ 可选为矩阵 $\boldsymbol{e}_{jk}$

$$\boldsymbol{e}_{jk}=\begin{matrix} \\ j\text{行}\end{matrix}\begin{pmatrix} & \overset{k\text{列}}{\vdots} & \\ \cdots\cdots & 1 & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix} \tag{2-4}$$

它的 j 行 k 列的矩阵元为 1，其余的矩阵元全为零．任一矩阵 $\boldsymbol{x}$（矩阵元素为 x_{jk}）可表为基矢 $\boldsymbol{e}_{jk}$ 的线性组合

$$\boldsymbol{x}=\sum_{jk} x_{jk}\boldsymbol{e}_{jk}. \tag{2-5}$$

2. 共变和逆变

假定坐标系 $\boldsymbol{u}_i$ 经受一变换 B(矩阵元记为 b_{ij})变到另一个坐标系 $\boldsymbol{u}'_i$

$$\boldsymbol{u}'_i=\sum_j b_{ij}\boldsymbol{u}_j, \tag{2-6a}$$

在坐标变换下,矢量 $\boldsymbol{x}$ 的坐标随之改变,而保持 $\boldsymbol{x}$ 为不变量,即

$$\boldsymbol{x}=\sum_i x_i\boldsymbol{u}_i=\sum_i x'_i\boldsymbol{u}'_i. \tag{2-7}$$

由(2-6a)式得

$$\boldsymbol{u}_i=\sum_j (B^{-1})_{ij}\boldsymbol{u}'_j. \tag{2-8}$$

将(2-8)式代入(2-7)式并利用 $\boldsymbol{u}'_j$ 为线性独立,得到

$$x'_j=\sum_i x_i(B^{-1})_{ij}.$$

令矩阵

$$A=\widetilde{B}^{-1} \tag{2-9}$$

(~代表转置),A 的矩阵元记为 a_{ij},则

$$x'_i=\sum_j a_{ij}x_j. \tag{2-6b}$$

令 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{u}')$ 代表由 $\boldsymbol{u}_i(\boldsymbol{u}'_i)$ 构成的 n 行一列矩阵,$\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}')$ 为由 $x_i(x'_i)$ 构成的 n 行一列矩阵(勿将它与抽象矢量 $\boldsymbol{x}$ 相混).(2-6a)式和(2-6b)式可写成

$$\boldsymbol{u}'=B\boldsymbol{u}, \tag{2-10a}$$

$$\boldsymbol{x}'=A\boldsymbol{x}=\widetilde{B}^{-1}\boldsymbol{x}. \tag{2-10b}$$

上式表明基底 $\boldsymbol{u}$ 和坐标 $\boldsymbol{x}$ 的变换性质一般说来不一样,我们称变换性质和基底相同的量为共变(covariant)矢量.变换性质和坐标相同的为逆变(contravariant)矢量.对于正交变换 $\widetilde{B}=B^{-1}$,有 $A=\widetilde{B}^{-1}=B$,即共变和逆变合一.

3. 度规张量

量子力学中,我们定义两个基矢 $|\varphi_i\rangle$ 和 $|\varphi_j\rangle$ 的标量积为

$$(\varphi_i,\ \varphi_j)\equiv\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=g_{ij}=g_{ji}^*=\langle\varphi_j|\varphi_i\rangle^*. \tag{2-11}$$

(g_{ij})称为度规张量,它是一厄米矩阵,量子力学中经常取正交归一基矢,这时度规张量最简单,$g_{ij}=\delta_{ij}$,即为单位矩阵.

n 维空间 L_n 中,n 个正交归一的基矢必构成 L_n 的一个完备系,正交归一完备性表为:

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=\delta_{ij}, \tag{2-12a}$$

$$\sum_{i=1}^n|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|=1. \tag{2-12b}$$

非正交归一但互相线性独立的 n 个基矢,仍构成 L_n 的一个完备系,这时(2-12)式将被以下更普遍的式子所代替[1)]

$$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=g_{ij}, \tag{2-13a}$$

$$\sum_{i,j=1}^n|\varphi_i\rangle(g^{-1})_{ij}\langle\varphi_j|=1. \tag{2-13b}$$

这里 g^{-1} 为矩阵(g_{ij})的逆矩阵.若 $g_{ij}=g_i\delta_{ij}$,则 $(g^{-1})_{ij}=g_i^{-1}\delta_{ij}$,因此对正交但不归一的基矢有

1) 利用 $|\psi\rangle=\sum_i a_i|\varphi_i\rangle$,$\langle\varphi_j|\psi\rangle=\sum_i a_ig_{ji}$,于是 $a_i=\sum_j(g^{-1})_{ij}\langle\varphi_j|\psi\rangle$,$|\psi\rangle=\sum_{ij}|\varphi_i\rangle(g^{-1})_{ij}\langle\varphi_j|\psi\rangle$,由此即得到(2-13b)式.

$$g_i^{-1}\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=\delta_{ij}, \tag{2-14a}$$

$$\sum_{i=1}^{n} g_i^{-1}|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|=1. \tag{2-14b}$$

对非正交基$\{|\varphi_i\rangle\}$的另一种处理方法是引入另一组基矢$\{|\bar{\varphi}_i\rangle\}$，称为 dual bases. ($|\varphi_i\rangle$和$|\bar{\varphi}_i\rangle$又称为 biorthogonal set of eigenfunctions, 见 Morse 和 Feshbach 1953)，使得$\{|\bar{\varphi}_i\rangle\}$和$\{|\varphi_i\rangle\}$正交

$$\langle\bar{\varphi}_i|\varphi_j\rangle=\delta_{ij}. \tag{2-15a}$$

而完备性(2-13b)式变为

$$\sum_{i=1}^{n}|\varphi_i\rangle\langle\bar{\varphi}_i|=1. \tag{2-15b}$$

(2-15)式和(2-12)式形式上很相似，在第八章和第十章我们将要碰到非正交基.

以上定义可推广到任意线性空间 L. 若基矢为 $\boldsymbol{u}_i$, $\boldsymbol{u}_j$, $\cdots$, 标量积定义为

$$(\boldsymbol{u}_i,\ \boldsymbol{u}_j)=g_{ij}=g_{ji}^*. \tag{2-16}$$

g_{ij} 为指定的一个复数，g_{ij} 值的不同指定对应于不同的标量积定义. 给定了度规张量 g_{ij} 后，也就决定了空间 L 中任意两个矢量的标量积

$$(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})=(\sum_i x_i\boldsymbol{u}_i,\ \sum_j y_j\boldsymbol{u}_j)=\sum_{ij}x_i^*g_{ij}y_j. \tag{2-17}$$

因为 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 都是不变量(见(2-7)式)，所以标量积也是不变量.

幺正空间：定义了标量积的空间称为幺正空间. 同一空间 L 中标量积的不同定义给出不同的幺正空间.

以后我们讨论的都是幺正空间.

以后谈到基矢时，除非特别说明，都指正交归一基矢. §2.11 附录则专门讨论非正交归一基.

§2.2 线性算符及其矩阵表示

如果一个算符 R 作用在空间 L 的任一矢量 $\boldsymbol{x}$ 上，都将 $\boldsymbol{x}$ 变成 L 空间中另一矢量 $\boldsymbol{y}$

$$\boldsymbol{y}=R\boldsymbol{x}, \tag{2-18}$$

则称空间 L 在算符 R 作用下为封闭，或说 L 是算符 R 的不变空间. 上式规定了空间 L 到其自身的一个映射. 如果 R 满足

$$R(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z})=R\boldsymbol{x}+R\boldsymbol{z},\ R(\alpha\boldsymbol{x})=\alpha R\boldsymbol{x}, \tag{2-19}$$

则称 R 为线性算符. 至于算符对 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{z}$ 如何作用可根据需要来定义.

注意，在定义算符 R 时不涉及到具体坐标系，因此算符 R 和矢量 $\boldsymbol{x}$ 一样，具有“固有的”(intrinsic)意义.

在实用中，为了方便起见我们总是要引进坐标系的. 我们先用量子力学中大家熟悉的符号进行讨论. 令 $|\varphi_1\rangle$, $\cdots$, $|\varphi_n\rangle$ 为空间 L 中的一组正交归一基矢. 假定 L 在算符 R 作用下为封闭，则 R 作用在任一基矢 $|\varphi_i\rangle$ 上必可表为 n 个基矢的线性组合：

$$R|\varphi_i\rangle=\sum_j D_{ji}(R)|\varphi_j\rangle. \tag{2-20a}$$

利用基矢的正交归一性得展开系数

$$D_{ji}(R)=\langle\varphi_j|R|\varphi_i\rangle. \tag{2-21}$$

矩阵 $D(R)$ 称为算符 R 在 $\{\varphi_i\}$ 表象中的矩阵表示(或表示矩阵)；给定了 $D(R)$，也就规定了算符对基矢的作用．又因为任一态矢 $|\psi\rangle$ 均可表为基矢 $|\varphi_i\rangle$ 的线性组合，所以这样也就决定了算符对L 中任一态矢的作用．令 $|\psi\rangle=\sum_i a_i|\varphi_i\rangle$，由(2-20a)式得

$$R|\psi\rangle=R\sum_i a_i|\varphi_i\rangle=\sum_i a_iR|\varphi_i\rangle=\sum_{ij} D_{ji}(R)a_i|\varphi_j\rangle, \tag{2-22a}$$

这里 a_i 视为常系数，算符 R 仅对基矢作用，将 $|\varphi_i\rangle\to|\varphi_i'\rangle$．但我们也可以把 R 对 $|\psi\rangle$ 的作用视为基底不变，而将 $|\psi\rangle$ 的坐标(即 $|\psi\rangle$ 在 $\{\varphi_i\}$ 表象中的波函数)由 $\{a_i\}\to\{a_i'\}$，于是

$$R|\psi\rangle=|\psi'\rangle=\sum_j a_j'|\varphi_j\rangle. \tag{2-22b}$$

比较(2-22a)和(2-22b)式得

$$a_j'=\sum_i D_{ji}(R)a_i. \tag{2-20b}$$

若将 $\{|\varphi_i\rangle\}$ 和 $\{a_i\}$ 看作列向量 $|\boldsymbol{\varphi}\rangle$ 和 $\boldsymbol{a}$，则(2-20a)式和(2-20b)式可写成

$$\boldsymbol{R}|\boldsymbol{\varphi}\rangle=\tilde{D}(R)|\boldsymbol{\varphi}\rangle, \tag{2-23a}$$

$$\boldsymbol{Ra}=\boldsymbol{a}'=D(R)\boldsymbol{a}. \tag{2-23b}$$

注意二者的区别．

逆算符的表示矩阵：由 $\boldsymbol{RR}^{-1}=1$ 以及(2-12b)式得

$$\sum_j\langle\varphi_i|R|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|R^{-1}|\varphi_k\rangle=\delta_{ik}. \tag{2-24a}$$

$$\therefore\quad D(R^{-1})=D^{-1}(R). \tag{2-24b}$$

即逆算符 R^{-1} 的表示矩阵等于算符 R 的表示矩阵之逆．

厄米共轭算符：对定义在空间 L 上的任一算符 R，可按下式定义另一个算符 $R^\dagger$

$$\langle\varphi_j|R^\dagger|\varphi_i\rangle=\langle R\varphi_j|\varphi_i\rangle,\quad i,\ j=1,\ 2,\ \cdots n. \tag{2-25a}$$

$R^\dagger$ 称为 R 的厄米共轭算符．由(2-11)和(2-25a)式得

$$D(R^\dagger)=\tilde{D}^*(R)\equiv D^\dagger(R). \tag{2-25b}$$

即厄米共轭算符 $R^\dagger$ 的表示矩阵为算符 R 的表示矩阵的厄米共轭．

自轭算符：若

$$R^\dagger=R, \tag{2-26a}$$

即

$$\langle\varphi_j|R|\varphi_i\rangle=\langle R\varphi_j|\varphi_i\rangle,\quad i,\ j=1,\ 2,\ \cdots n, \tag{2-26b}$$

则称 R 为自轭算符．由(2-25b)式立即可知，自轭算符的表示矩阵为厄米矩阵：

$$D(R)=D^\dagger(R). \tag{2-26c}$$

幺正算符：规定了空间 L 的标量积和算符 R 对 L 中任一矢量 $|\psi\rangle$ 的作用后，如果对 L 中任意两个矢量 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ 下式都成立

$$\langle R\psi|R\psi'\rangle=\langle\psi|\psi'\rangle, \tag{2-27a}$$

则称算符 R 为幺正算符．由(2-25a)式得

$$\langle R\psi|R\psi'\rangle=\langle\psi|R^\dagger R|\psi'\rangle=\langle\psi|\psi'\rangle. \tag{2-27b}$$

所以幺正算符满足

$$R^\dagger R=RR^\dagger=1,\quad R^\dagger=R^{-1}. \tag{2-28a, b}$$

引入基矢后，由(2-28b)，(2-25b)，(2-24b)得

$$D(R^\dagger)=D(R^{-1}), \tag{2-29a}$$

$$D^\dagger(R)=D^{-1}(R). \tag{2-29b}$$

即幺正算符的表示矩阵为一幺正矩阵

注意 一个算符是否为自轭或是否为幺正，即(2-26a)或(2-28)式是否成立，仅决定于该算符对空间矢量的作用和该空间中标量积的定义，和基矢选取无关. 但(2-26c)及(2-29b)的成立和基矢选取有关，实际上这两个式子只对正交归一基才成立（§2.11 附录(2-118)和(2-121 a)式给出它们在非正交归一基情形下的推广）. 即只有对正交归一基，自轭(幺正)算符的表示矩阵才是厄米(幺正)矩阵.

表象变换：若我们采用一组新基矢 $|\varphi'_i\rangle$，它和老基矢的关系为：

$$|\varphi'_i\rangle=\sum_k b_{ik}|\varphi_k\rangle. \tag{2-30}$$

B 为一幺正矩阵. 同一个算符 R 在新表象中的矩阵表示为

$$D'_{ji}(R)=\langle\varphi'_j|R|\varphi'_i\rangle. \tag{2-31}$$

将(2-30)式代入上式，立即得到新、老表示矩阵的关系

$$D'(R)=AD(R)A^{-1},\quad A=B^* \tag{2-32}$$

以上讨论可推广到任一线性空间，为此只需作以下记号替换

$$|\varphi_i\rangle\to\boldsymbol{u}_i,\quad |\psi\rangle\to\boldsymbol{x},\quad a_i\to x_i,$$

$$\langle\varphi_i|R|\varphi_j\rangle\to(\boldsymbol{u}_i,\ R\boldsymbol{u}_j),\ \langle R\varphi_i|R\varphi_j\rangle\to(R\boldsymbol{u}_i,\ R\boldsymbol{u}_j)\text{等} \tag{2-33}$$

§2.3 完备算符集

1. 自轭算符的本征空间

若 C 为一自轭算符，并已规定了它对 L_n 空间 n 个基矢的作用

$$C|\varphi_b\rangle=\sum_a C_{ab}|\varphi_a\rangle. \tag{2-34a}$$

$$C_{ab}=D_{ab}(C)=\langle\varphi_a|C|\varphi_b\rangle. \tag{2-34b}$$

现在要求 C 的本征矢量

$$|\psi^\nu\rangle=\sum_a u_{\nu a}|\varphi_a\rangle, \tag{2-35a}$$

$$C|\psi^\nu\rangle=\nu|\psi^\nu\rangle. \tag{2-35b}$$

将(2-35a)代入(2-35b)式得

$$\sum_b u_{\nu b}C|\varphi_b\rangle=\nu\sum_{a'}u_{\nu a'}|\varphi_{a'}\rangle.$$

上式左乘 $\langle\varphi_a|$ 得

$$\sum_{b=1}^n(C_{ab}-\nu\delta_{ab})u_{\nu b}=0,\quad a=1,\ 2,\ \cdots n. \tag{2-36}$$

上式为 n 个未知数 $u_{\nu b}$ 的 n 个线性齐次方程，有解条件为系数行列式等于零，即

$$\det|C_{ab}-\nu\delta_{ab}|_n^1=\prod_{i=1}^k(\nu-\nu_i)^{M_{\nu_i}}=0. \tag{2-37}$$

上式称为特征方程或久期方程. 由该代数方程可定出本征值 ν_i 及其多重性（即简并度）M_{ν_i}. 这里我们假定有 k 个不同的本征值 $\nu_1,\ \nu_2,\ \cdots,\ \nu_k$. 显然

$$\sum_{i=1}^k M_{\nu_i}=n. \tag{2-38}$$

将某一本征值例如 ν 代入到方程组(2-36)式,可得到 M_ν 个线性独立矢量[1)]

$$|\psi_j^{(\nu)}\rangle, \quad j=1, 2, \cdots, M_\nu \tag{2-39}$$

它们构成一个 M_ν 维空间 L_ν,称为算符 C 的本征空间,它是 L 的一个子空间($M_\nu \leqslant n$),该空间中的任一矢量

$$|\phi^{(\nu)}\rangle=\sum_{i=1}^{M_\nu} c_i|\psi_i^{(\nu)}\rangle, \tag{2-40}$$

都是 C 的本征矢量,本征值为 ν. 因此可用以下记号定义 C 的本征空间 L_ν

$$CL_\nu=\nu L_\nu. \tag{2-41}$$

由于 C 为自轭算符, ν 值不相同的本征矢量互相正交,即不同的子空间 L_ν 互相正交.这样就把 n 维空间 L_n 分解成 C 的互相正交的 k 个本征空间的直和,记为

$$L_n=\sum_{\nu=1}^{k}\oplus L_\nu. \tag{2-42}$$

2. 完备算符集 CSCO

若 $C=(C_1, C_2, \cdots C_l)$ 为一组两两互相对易的算符,如果它们在空间 L_n 的共同本征矢量全不简并,则称 C 为空间 L_n 的 CSCO. 令 C 的共同本征矢量为 $|\psi_{\lambda_1\cdots\lambda_l}\rangle$,它满足联立本征方程

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_l \end{pmatrix}|\psi_{\lambda_1\cdots\lambda_l}\rangle=\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_l \end{pmatrix}|\psi_{\lambda_1\cdots\lambda_l}\rangle. \tag{2-43a}$$

简写为

$$C|\psi_\lambda\rangle=\lambda|\psi_\lambda\rangle, \quad \lambda=(\lambda_1\cdots\lambda_l), \tag{2-43b}$$

$$|\psi_\lambda\rangle=\sum_a u_{\lambda a}|\varphi_a\rangle. \tag{2-43c}$$

在空间 L_n 中,C 显然有也只有 n 个不同的 λ(两组($\lambda_1\cdots\lambda_l$)中,只要有一个 λ_i 不等,就认为两个 λ 不等),一个 λ 只对应一个本征矢量 $|\psi_\lambda\rangle$. n 个本征矢量 $|\psi_\lambda\rangle$ 构成 L_n 的完备系.如果所有 C_i 都为自轭算符,则 λ 不同的本征矢量正交,即 CSCO 的本征矢量构成 L_n 空间的一组正交、归一、完备系

$$\langle\psi_\lambda|\psi_{\lambda'}\rangle=\delta_{\lambda\lambda'}, \quad \sum_\lambda|\psi_\lambda\rangle\langle\psi_\lambda|=1. \tag{2-44a, b}$$

由(2-43c)式,上式可表为

$$\sum_a u_{\lambda a}^* u_{\lambda' a}=\delta_{\lambda\lambda'}, \quad \sum_\lambda u_{\lambda a}^* u_{\lambda b}=\delta_{ab}, \tag{2-44c, d}$$

即 $\|u_{\lambda a}\|$ 为幺正矩阵.

注意 CSCO 是和空间相联系的. L_n 空间的 CSCO 到了另一空间 L_m 一般就不再是 CSCO 了.

我们知道,有限空间的基矢 $|\psi_\lambda\rangle$ 总可用一个不连续的参数 λ 来标志.对应于此参数 λ,我们可按下式引进一个线性算符 C(见 Dirac(1958), § 14):

$$C|\psi_\lambda\rangle=\lambda|\psi_\lambda\rangle.$$

上式表明,每一基矢都是线性算符 C 的本征矢,参数 λ 就是 C 的本征值.显然,这个算符 C 就是该有限空间中的 CSCO. 由此可知,有限空间的 CSCO 总可选为只有一个算符所构成.

为了计算方便,我们总是希望 CSCO 中所包含的算符个数尽可能地少.

显然,空间 L_n 可分解成其 CSCO 的 n 个(一维)本征空间的直和.

1) 如果 C 不是自轭算符,则有可能找不到 M_ν 个线性独立矢量.

§2.4 群的表示，逆步(contragredient)表示

若作用在线性空间 L 中的一个矩阵群 $D=\{D(R)\}$ 准同构于一个群 $G=\{R\}$，则称 D 是 G 的一个表示，L 称为群 G 的表示空间，L 的维数称为表示的维数．若 R, S 为群 G 的元素，根据准同构要求有：

$$D(RS)=D(R)D(S), \tag{2-45a}$$

$$D(R^{-1})=[D(R)]^{-1}, \tag{2-45b}$$

$$D(e)=1. \tag{2-45c}$$

如果矩阵群 $D(G)$ 和群 G 同构，则称 $D(G)$ 为 G 的忠实表示，这时群 G 的元素 R 和矩阵 $D(R)$ 一一对应．

容易证明如果一个空间 L，在群 G 所有元素作用下为封闭(或者说若 L 为群 G 的不变子空间)，则 L 构成群 G 的一个表示空间．L 中选定一组基矢 $\{\varphi_i\}$，群元算符在 $\{\varphi_i\}$ 表象(量子力学语言)中的矩阵表示即构成群 G 的一个表示 D，$|\varphi_i\rangle$ 称为表示 D 的荷载矢量．证明如下：根据封闭性有

$$|\varphi_i'\rangle=R_a|\varphi_i\rangle=\sum_{j=1}^{n}D_{ji}(R_a)\,|\varphi_j\rangle, \quad i=1\cdots n,\ a=1\cdots g. \tag{2-46}$$

$$D_{ji}(R_a)=\langle\varphi_j|R_a|\varphi_i\rangle. \tag{2-47}$$

(2-46)式写成矩阵形式为

$$R_a\boldsymbol{\varphi}=\widetilde{D}(R_a)\boldsymbol{\varphi}. \tag{2-48}$$

不难证明(2-47)式定义的矩阵表示满足要求(2-45)式，对非正交归一基情形，证明见§2.11 附录．

恒等表示 任何一个群都有一个最简单的表示 $D(R)\equiv1$，对任一 $R\in G$．此称为恒等表示．

Contragredient *表示*：和群 G 的表示 D 相对应的另一表示 $\widetilde{D}^{-1}$ 称为 G 的逆步(contragredient)表示(或 conjugate 表示或 adjoint 表示)．

根据(2-7)式和(2-10)式可知，若 $\{\boldsymbol{u}_i\}$ 荷载群 G 的表示 D，$\{x_i\}$ 荷载群 G 的表示 $\widetilde{D}^{-1}$，则量

$$\boldsymbol{x}=\sum_i x_i\boldsymbol{u}_i,$$

在群 G 作用下为一不变量．

对幺正表示

$$\widetilde{D}^{-1}(R)=D^*(R), \tag{2-49}$$

即 D 的 contragredient 表示就是 D 的复数共轭．因为本书讨论的都是幺正表示，因此以后就称 contragredient 表示为复共轭表示

例 1 R_2 群．

$\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$ 两个单位矢量构成二维空间的基矢．转动算符 $R(\varphi)$ 对基矢 $\boldsymbol{u}_i$ 的作用，就定义为将 $\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$ 逆时针(即绕 $\boldsymbol{u}_3$ 或 z 轴)转过同样角度 φ，

$$\begin{aligned} R(\varphi)\boldsymbol{u}_1&=\boldsymbol{u}_1'=\cos\varphi\,\boldsymbol{u}_1+\sin\varphi\,\boldsymbol{u}_2,\\ R(\varphi)\boldsymbol{u}_2&=\boldsymbol{u}_2'=-\sin\varphi\,\boldsymbol{u}_1+\cos\varphi\,\boldsymbol{u}_2. \end{aligned} \tag{2-50}$$

由定义(2-46)式或(2-47)式得到 R_2 群的一个二维表示

$$D(\varphi)=D(R(\varphi))=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix},\quad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi. \tag{2-51}$$

无限多个矩阵(2-51)式构成一个矩阵群，它是 R_2 群的一个忠实表示.

例 2 S_3 群的表示.

假定有三个电子，两个处于自旋朝上态 α，一个处于自旋朝下态 β，这三个电子系统在自旋空间的状态可能是

φ_1: 1, 2 电子朝上，3 朝下；

φ_2: 1, 3 电子朝上，2 朝下；

φ_3: 2, 3 电子朝上，1 朝下.

用 ξ 代表电子自旋坐标(ξ 只能取分立值 $+1/2$ 或 $-1/2$, 见布洛欣采夫 § 59.)，于是

$$\begin{aligned}\varphi_1&=x_\alpha(\xi_1)x_\alpha(\xi_2)x_\beta(\xi_3)=|\alpha\alpha\beta\rangle^{1)},\\ \varphi_2&=x_\alpha(\xi_1)x_\beta(\xi_2)x_\alpha(\xi_3)=|\alpha\beta\alpha\rangle,\\ \varphi_3&=x_\beta(\xi_1)x_\alpha(\xi_2)x_\alpha(\xi_3)=|\beta\alpha\alpha\rangle,\end{aligned} \tag{2-52}$$

φ_1, φ_2, φ_3 构成一个三维空间. 现在定义置换群元 $\begin{pmatrix}1&2&3\\ i&j&k\end{pmatrix}$ 对 φ_i 的作用为将 $\xi_1\to\xi_i$, $\xi_2\to\xi_j$, $\xi_3\to\xi_k$, 即置换电子自旋坐标 ξ 的下标(注意不是置换 φ_i 的下标). 例如

$$(123)\,|\alpha\alpha\beta\rangle=(123)\,(x_\alpha(\xi_1)x_\alpha(\xi_2)x_\beta(\xi_3))=x_\alpha(\xi_2)x_\alpha(\xi_3)x_\beta(\xi_1)=|\beta\alpha\alpha\rangle. \tag{2-53}$$

也就是说(123)对 $|\alpha\alpha\beta\rangle$ 的作用为将处于第一个位置的态指标 α 搬到第二个位置，处于第二个位置的态指标 α 搬到第三个位置，把第三个位置上的态指标 β 搬到第一个位置. 显然 φ_1, φ_2, φ_3 在 S_3 群作用下为封闭，构成 S_3 群的一个表示基底. 根据以上定义容易得到 S_3 群的一个三维表示

$$\begin{matrix} D(e) & D(12) & D(13) & D(23) & D(123) & D(132)\\ \begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix} & \begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\end{matrix} \tag{2-54}$$

习　　题

1. 验证(2-54)式是 S_3 群的一个忠实表示.

由以上讨论可知，群论中讨论的表示和量子力学中讨论的表象可以说是一回事，英文都是 representation. 仅有的差别是: (1) 量子力学中态矢量构成的表象空间都是物理空间，而群表示空间则可以是任意的线性空间. (2) 力学量对应的算符都是自轭算符，而群元算符既有自轭，也有非自轭算符，但大多是幺正算符. (3) 对非正交归一基，两者关于一个算符的表示矩阵的定义有差别. 见 § 2.11 附录.

§ 2.5　幺 正 表 示

如果群 G 的所有元素的矩阵表示都为幺正矩阵

1) $|\alpha\alpha\beta\rangle=\chi_\alpha(\xi_1)\chi_\beta(\xi_3)\chi_\alpha(\xi_2)=\chi_\beta(\xi_3)\chi_\alpha(\xi_2)\chi_\alpha(\xi_1)$.

$$D^\dagger(R_a)=D^{-1}(R_a),\quad a=1,\ 2,\ \cdots g,\tag{2-54'}$$

则称 $D(G)$ 为群 G 的幺正表示. 由 §2.3 可知, 幺正算符在正交归一基上的表示必为幺正表示, 而在非正交归一基上则可能有幺正表示和非幺正表示(见 §8.7).

如果 $|\varphi_1\rangle,\ \cdots,\ |\varphi_n\rangle$ 为 L 空间一组正交归一基, 经群元 R 作用后, 得到另一组正交归一基 $|\varphi_1'\rangle,\cdots,|\varphi_n'\rangle$ ((2-46)式), 则(2-47)式给出的 $D(R)$ 必为幺正矩阵, 因此 $D(G)$ 必为 G 的幺正表示. §2.4 例 1, 例 2 就是从一组正交归一基到另一组正交归一基的变换, 容易看出(2-51)式和(2-54)式给出的表示都满足幺正条件(2-54′)式.

§2.4 中我们用单位矢量作为 R_2 群的表示基底, 以后我们更常用的是用组态空间波函数 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 作为 R_2 或 R_3 群表示的基. 现在来定义转动算符 $R_z(\varphi)$ 对波函数 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 的作用, 这个作用的效果是将场 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 绕 z 轴转过 φ 角得到一个新的场 $\varphi'(\boldsymbol{x})$, 而坐标轴则保持不动. 在 $R=R_z(\varphi)$ 的作用下, 空间某一点 $P(\boldsymbol{x}_0)$ 转动到 $P'(\boldsymbol{x}_0')$,

$$\boldsymbol{x}_0'=R\boldsymbol{x}_0.\tag{2-55}$$

显然新场 $\varphi'(\boldsymbol{x})$ 在 P' 点的数值等于原来的场在 P 点的值

$$\varphi'(\boldsymbol{x}_0')=\varphi(\boldsymbol{x}_0).\tag{2-56}$$

由(2-55)式得 $\boldsymbol{x}_0=R^{-1}\boldsymbol{x}_0'$, 代入上式得

$$\varphi'(\boldsymbol{x}_0')=\varphi(R^{-1}\boldsymbol{x}_0').\tag{2-57}$$

由于 $\boldsymbol{x}_0'$ 为空间任意一点的坐标, 上式中令 $\boldsymbol{x}_0'\to\boldsymbol{x}$ 仍成立, 于是

$$R\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi'(\boldsymbol{x})=\varphi(R^{-1}\boldsymbol{x}).\tag{2-58}$$

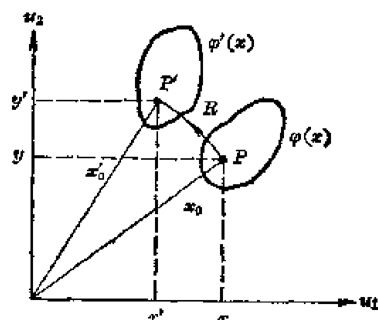


图 2.4

以后我们始终按(2-58)式来定义转动算符对组态空间波函数的作用, 即坐标轴保持不动, 而将场转动.

例 R_2 群.

在 $R(\varphi)$ 作用下, 空间某一点 P 转到 P', 设 P, P' 点坐标分别为 $(x,\ y)$ 和 $(x',\ y')$ (见图 2.4),

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}=R(\varphi)\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}.\tag{2-59}$$

现在若 $\varphi_1(\boldsymbol{x})$ 代表一个 p_x 电子, $\varphi_2(\boldsymbol{x})$ 代表一个 p_y 电子(p 代表 $l=1$), 即 $\varphi_1=x$, $\varphi_2=y$ (这里略去了无关的常数因子). 令 φ_1, φ_2 为表示的基底, 转动算符 $R(\varphi)$ 对组态空间波函数 $\varphi_1(\boldsymbol{x})$ 和 $\varphi_2(\boldsymbol{x})$ 的作用由(2-58)式定义

$$\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}\xrightarrow{R}\begin{pmatrix}\varphi_1'\\ \varphi_2'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}R^{-1}x\\ R^{-1}y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\varphi & \sin\varphi\\ -\sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\tilde{D}(\varphi)\begin{pmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\end{pmatrix}.\tag{2-60a}$$

因此以波函数 $\varphi_1=x$, $\varphi_2=y$ 为基时 $R(\varphi)$ 的矩阵表示

$$D(\varphi)=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}.\tag{2-60b}$$

此矩阵形式和(2-51)式相同. 以后凡谈到用 x, y(或 x, y, z)作为表示的基底时, 都应把 x, y(或 x, y, z)理解成波函数, 变换关系为(2-60)式, 而不应当把它看成坐标, 如看成坐标则变换关系为(2-59)式.

有了标量积定义(2-11)式, 和群算符对 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 作用的定义(2-58)式, 就可来检查 R 是否为幺正算符. 显然有

$$\langle R\varphi(\boldsymbol{x})|R\psi(\boldsymbol{x})\rangle=\int[R\varphi(\boldsymbol{x})]^*R\psi(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\int\varphi^*(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}, \tag{2-61}$$

这里

$$\boldsymbol{x}'=R^{-1}\boldsymbol{x}.$$

由于体积元在转动下不变

$$d\boldsymbol{x}'=d\boldsymbol{x}. \tag{2-62}$$

代入(2-61)式得

$$\langle R\varphi(\boldsymbol{x})|R\psi(\boldsymbol{x})\rangle=\int\varphi^*(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}'=\int\varphi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\langle\varphi(\boldsymbol{x})|\psi(\boldsymbol{x})\rangle.$$

由此可见,转动算符为幺正算符.

其它群算符如空间反演、平面反射等对组态空间波函数的作用也都按(2-58)式定义,并且不难证明,在这些变换下,(2-62)式都满足,因此都为幺正算符.

上面讨论容易推广到多粒子波函数.

$$\begin{gathered}\Psi(\boldsymbol{X})=\psi_1(\boldsymbol{x}_1)\psi_2(\boldsymbol{x}_2)\cdots\psi_n(\boldsymbol{x}_n),\\ \Phi(\boldsymbol{X})=\varphi_1(\boldsymbol{x}_1)\varphi_2(\boldsymbol{x}_2)\cdots\varphi_n(\boldsymbol{x}_n),\\ d\boldsymbol{X}=d\boldsymbol{x}_1d\boldsymbol{x}_2\cdots d\boldsymbol{x}_n=d\boldsymbol{X}'.\end{gathered} \tag{2-63}$$

$$R\Psi(\boldsymbol{X})=\Psi(R^{-1}\boldsymbol{X})\equiv\psi_1(R^{-1}\boldsymbol{x}_1)\psi_2(R^{-1}\boldsymbol{x}_2)\cdots\psi_n(R^{-1}\boldsymbol{x}_n). \tag{2-64}$$

因此这些群算符在多粒子体系波函数构成的表示空间中也仍为幺正算符.

§2.6 正则表示,群空间和群代数

1. 正则表示

若有一函数 Φ 在群 G 的 g 个元素作用下能得到 g 个线性独立的函数,则我们说函数 Φ 相对于群 G 没有任何对称性. 如果 Φ 在所有 g 个元素作用下都不变,则称 Φ 为全对称函数. 介于这二者之间的 Φ 称为有部分对称性. 例如对 S_3 群来说, $|\alpha\beta\gamma\rangle$, $|\alpha\alpha\beta\rangle$, $|\alpha\alpha\alpha\rangle$ 分别为没有任何对称性,有部分对称性和完全对称波函数. 这里 α, β, γ 代表三个单粒子态.

以后用 Φ_0 代表没有任何对称性的函数. 为简单起见,假定 Φ_0 经 g 个群元作用后得到 g 个正交归一的函数

$$\varphi_a=R_a\Phi_0,\quad a=1,\ 2,\ \cdots,\ g. \tag{2-65a}$$

$$\langle\varphi_a|\varphi_b\rangle=\delta_{ab}. \tag{2-65b}$$

$\varphi_1\cdots\varphi_g$ 荷载群 G 的一个 g 维表示,称为群 G 的正则表示

$$R_c\varphi_b=\sum_{a=1}^{g}D_{ab}(R_c)\varphi_a. \tag{2-66}$$

由定义(2-65a),上式可写成:

$$R_cR_b\Phi_0=\sum_{a=1}^{g}D_{ab}(R_c)R_a\Phi_0. \tag{2-67}$$

由此可知,正则表示矩阵元满足

$$D_{ab}(R_c)=\begin{cases}1, & \text{当 } R_cR_b=R_a,\\ 0, & \text{其它情形}.\end{cases} \tag{2-68}$$

条件 $R_cR_b=R_a$ 等价于

$$R_cR_b\Phi_0=R_a\Phi_0,\quad \text{即}\quad R_c\varphi_b=\varphi_a. \tag{2-69}$$

由(2-68)式看到，任一群元所对应的正则表示矩阵中同一行或同一列中只有一个数为1，其余数全为零．除了幺元素外，所有群元的正则表示矩阵的对角元素都为零．

例 S_3 群的正则表示．

令 $\Phi_0=|\alpha\beta\gamma\rangle$．在 S_3 群6个置换(1-12)式作用下得到以下6个波函数：

$$\begin{matrix}\varphi_1=e\Phi_0 & \varphi_2=(12)\Phi_0 & \varphi_3=(13)\Phi_0 & \varphi_4=(23)\Phi_0 & \varphi_5=(123)\Phi_0 & \varphi_6=(132)\Phi_0 \\ |\alpha\beta\gamma\rangle, & |\beta\alpha\gamma\rangle, & |\gamma\beta\alpha\rangle, & |\alpha\gamma\beta\rangle, & |\gamma\alpha\beta\rangle, & |\beta\gamma\alpha\rangle.\end{matrix} \tag{2-70}$$

我们可以直接根据定义(2-69)式来求出正则表示矩阵，但如果已经有了群表1.2则可利用(2-68)式由群表直接写下正则表示矩阵．如 S_3 群表1.2的第5行(对应于 $R_c=(123)$)给出的编码数5, 3, 4, 2, 6, 1就相继给出 $D(123)$ 中1至6列矩阵元不为零的行号，即

$$D_{51}=D_{32}=D_{43}=D_{24}=D_{65}=D_{16}=1.$$

我们采用记号 $\{534261\}$ 代表这个矩阵，即

$$D(123)=\{534261\}=\left(\begin{array}{cc|cc|cc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{array}\right) \tag{2-71a}$$

类似地，由表1.2得到

$$\begin{aligned} &D(e)=\{123456\}, \quad D(12)=\{216543\}, \quad D(13)=\{351624\}, \\ &D(23)=\{465132\}, \quad D(123)=\{534261\}, \quad D(132)=\{642315\}. \end{aligned} \tag{2-71b}$$

后面第三章中将看到，正则表示可以说是最复杂的(维数最大的)一种可约表示，在等价的意义上，它包含了群 G 所有的不可约表示，因此非常重要．

2．群空间

前面讲到，g 个 $\varphi_a=R_a\Phi_0$ 构成群 G 的正则表示的基矢；而(2-67)和(2-66)式是等价的，如果(2-67)式两边除以 Φ_0 则得到

$$R_cR_b=\sum_{a=1}^{g}D_{ab}(R_c)R_a. \tag{2-72}$$

由此看到，我们其实可以脱离 Φ_0，而直接把 g 个群元 $\{R_a\}$ 看成荷载正则表示的基矢反而更加简单．因为 R_a 是基矢，那就可定义 R_a 的加法以及复数和 R_a 的乘法(注意，群的定义里没有这两种运算)，定义式同(2-1)式．于是 g 个群元 $\{R_a\}$ 就构成一个 g 维线性空间，称为*群空间* L_g，它和空间 $\{\varphi_a\}$ 是一对一的映射．$\{\varphi_a\}$ 空间中度规由(2-65b)式规定，群空间中可对应地定义两个基矢 R_a，R_b 的度规(即标量积)为

$$\langle R_a|R_b\rangle\equiv(R_a,\ R_b)=g_{ab}=\delta_{ab}. \tag{2-73}$$

群空间中任一矢量 P 可表为 g 个基矢的线性组合

$$P=\sum_{a=1}^{g}u_aR_a=\sum_{a=1}^{g}u(R_a)R_a, \tag{2-74}$$

$u_a=u(R_a)$ 为复数．由(2-73)式和(2-74)式得到两个矢量 $P^{(i)}$ 和 $P^{(j)}$ 的标量积为

$$\langle P^{(i)}|P^{(j)}\rangle\equiv(P^{(i)},\ P^{(j)})=\sum_{a=1}^{g}u_a^{(i)*}u_a^{(j)}. \tag{2-75}$$

3．群代数

(2-66)式中 R_c 为群元算符，φ_b 为基矢，和它相对应的(2-72)式中 R_c 为算符，R_b 为基

矢．为了区别，可在 R_c 上加一记号"∧"以示它为算符，这样(2-72)式可写成

$$\hat{R}_c R_b = R_c R_b = \sum_{a=1}^{g} D_{ab}(R_c) R_a. \tag{2-76}$$

即 $\hat{R}_c$ 对 R_b 的作用定义为群元 R_c 和 R_b 的积(按群的乘法定义)．因此，记号"∧"其实可以不加，以后一律省去．由此看到，*群元既是算符，又是基矢*[1]．这样在群空间中除了线性组合运算

$$P^{(i)} + P^{(j)} = \sum_a (u_a^{(i)} + u_a^{(j)}) R_a \in L_g, \tag{2-77}$$

外还多了一种运算，即按群的乘法规则进行乘法运算．L_g 中任意两个矢量的积显然仍属于 L_g

$$P^{(i)} P^{(j)} = \sum_{ab} u_a^{(i)} u_b^{(j)} R_a R_b \quad \in L_g. \tag{2-78}$$

根据数学上的定义，一个线性空间在某种乘法规则下为封闭，则称为一个代数．

代数另一个等价定义是：若一组元素(如 $\{R_a\}$)在线性组合和乘法运算下为封闭，则说它构成一个代数 A．

群空间在群的乘法规则下为封闭，所以构成一个代数，称为*群代数*．(2-74)式 P 就称为群代数的元素，它在线性组合(2-77)式和乘法运算(2-78)式下是封闭的．

若空间 B 为 A 的一个子空间，它在代数 A 的乘法定义下也为封闭，则称代数 B 为代数 A 的子代数．

前面定义了群 G 的表示 $D(G)$，类似地可定义群代数的表示．若 G 的表示为 $D(G)$，则立即给出群代数元素 $P = \sum_a u_a R_a$ 的一个表示：

$$D(P) = \sum_a u_a D(R_a). \tag{2-79}$$

反之，知道了群代数的表示 $D(P)$，只需令 P 等于某些特殊元素，就可得到群 G 的表示．因此讨论群的表示和群代数的表示是等效的．

§2.7　群上函数空间

群空间 L_g 中任一矢量 P 可表为(2-74)式，其中 g 个复数

$$\boldsymbol{u} = (u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_g) = (u(R_1),\ u(R_2),\ \cdots,\ u(R_g)) \tag{2-80}$$

可看作 P 在基 R_a 上的"坐标"，构成一个 g 维矢量．我们也可把它看成定义在群上的一个函数 $u(R)$，对不连续群，它是个弥散函数，即只在 $R = R_1,\ R_2,\ \cdots,\ R_g$ 等 g 个'点'上有数值 $u(R_1),\ u(R_2),\ \cdots,\ u(R_g)$[2]．有时我们也用 $u(R_a)$ 代表一个群上函数，注意这时宗量 R_a 应理解为一个"自变数"，而不是一个确定的"数"(即群元)．$\boldsymbol{u}$ 的全体构成一个空间，称为群上函数空间．该空间中显然只有 g 个独立矢量，例如我们可以取以下 g 个矢量作为群上函数空间的基矢

$$\boldsymbol{e}_1 = (1,\ 0,\ \cdots,\ 0),\ \boldsymbol{e}_2 = (0,\ 1,\ 0,\ \cdots,\ 0),\ \cdots,\ \boldsymbol{e}_g = (0,\ 0,\ \cdots,\ 1). \tag{2-81}$$

定义度规张量为

---

1) 其实这没有什么可奇怪的，在量子力学中，我们已遇到过类似的情形，如球谐函数 Y_{lm} 既可看作算符．又可看作基矢，在电多极跃迁矩阵元 $\langle\psi_{n_1l_1m_1}|r^lY_{lm}|\psi_{n_2l_2m_2}\rangle$ 中，中间一个 Y_{lm} 视为算符；$\psi_{n_il_im_i}$ 中的 $Y_{l_im_i}$ 视为基矢．

2) 对比自旋空间波函数 $u(\xi)$ 只在 $\xi = \pm1/2$ 处有定义 $u(1/2)$，$u(-1/2)$．

$$(\boldsymbol{e}_a,\ \boldsymbol{e}_b)=g_{ab}=\delta_{ab}. \tag{2-82}$$

群上函数空间中任一矢量 $\boldsymbol{u}$ 可表为

$$\boldsymbol{u}=\sum_{a=1}^{g}u(R_a)\boldsymbol{e}_a. \tag{2-83}$$

于是，任意两个群上函数的标量积为

$$\langle\boldsymbol{u}^{(i)}|\boldsymbol{u}^{(j)}\rangle=\sum_{a=1}^{g}(u^{(i)}(R_a))^*u^{(j)}(R_a). \tag{2-84}$$

任一群元 R 对群空间中任一矢量 P 的作用前面已有定义

$$RP=R\sum_{a=1}^{g}u(R_a)R_a=\sum_{a=1}^{g}u(R_a)RR_a \qquad [\text{和(2-22a)式比较}] \tag{2-85}$$

令
$$RR_a=R_b,\quad R_a=R^{-1}R_b$$

代入上式，并将对 a 的求和改为对 b 求和，得

$$RP=P'=\sum_{b=1}^{g}u(R^{-1}R_b)R_b=\sum_{b=1}^{g}u'(R_b)R_b, \qquad [\text{和(2-22b)式比较}] \tag{2-86}$$

即 R 对 P 作用可视为基底 $\{R_a\}$ 不变而将 P 的坐标 $u(R_a)\to u'(R_a)$，于是得到群元对群上函数作用为

$$u'(R_a)=Ru(R_a)=u(R^{-1}R_a). \tag{2-87a}$$

它和群元对组态空间波函数的作用(2-58)式形式上一样.

注意
$$RSu(R_a)=Ru(S^{-1}R_a)\neq u(R^{-1}S^{-1}R_a),$$

而应当是

$$RSu(R_a)=u((RS)^{-1}R_a)=u(S^{-1}R^{-1}R_a). \tag{2-87b}$$

由(2-84)式和(2-87)式容易证明

$$\langle R\boldsymbol{u}^{(i)}|R\boldsymbol{u}^{(j)}\rangle=\sum_{a=1}^{g}[u^{(i)}(R^{-1}R_a)]^*u^{(j)}(R^{-1}R_a)=\sum_{b=1}^{g}[u^{(i)}(R_b)]^*u(R_b)=\langle\boldsymbol{u}^{(i)}|\boldsymbol{u}^{(j)}\rangle.$$

因此，任一群元算符在群上函数空间都为幺正算符.

小结：组态空间 $\{\varphi_a\}$[(2-65a)式]，群空间 $\{R_a\}$ 和群上函数空间 $\{u(R_a)\}$ 三者都是互相一、一对应的，都构成群 G 的正则表示. 下面讨论正则表示的分解时，可在三个空间中的任一个中进行，对有限群来说，在群空间讨论问题最简洁，但实用上不如组态空间方便. 对连续群来说，则在群上函数空间讨论问题最简单. 因此三个空间各有各的用途.

§2.8 等价表示和特征标

在空间 L_n 中，如果我们按(2-30)式作基底变换，则所有群元的矩阵表示都经受一相似变换(2-32)式，即

$$D'(R)=AD(R)A^{-1},\ R\in G. \tag{2-88}$$

这里 $A=\tilde{B}^{-1}$ 为一固定的矩阵. 显然 $D'(G)$ 也是群 G 的一个表示. 我们称满足(2-88)式的两个表示 $D'(R)$ 和 $D(R)$ 为*等价表示*，而它们所对应的表示空间称为*等价的表示空间*. 因此从一个表示 $D(G)$ 出发，可以构造出无穷多个等价表示来.

既然各种等价表示是同一算符在等价的表示空间中的不同表现形式，那么在这些等价表示中有什么东西代表不变的本质呢？容易证明，一个矩阵的迹(trace)是个不变量，它不随基底变换而变换：

$$\mathrm{Tr}D'(R)=\sum_i D'_{ii}(R)=\sum_{ikl}A_{ik}D_{kl}(R)A^{-1}_{li}=\sum_{kl}\delta_{kl}D_{kl}(R)$$
$$=\sum_k D_{kk}(R)=\mathrm{Tr}D(R). \tag{2-89}$$

定义群元 R 在表示 D 中的特征标为

$$\chi(R)=\mathrm{Tr}D(R). \tag{2-90}$$

于是得到一个结论：等价表示的特征标相同

$$\chi'(R)=\chi(R).$$

以后用 $\chi^{(\mu)}(R)$ 代表 (μ) 表示中群元 R 的特征标.

根据共轭元素类的定义(1-17)式，类似地可证明同一类中所有的元素都具有相同的特征标. 因此特征标是类的函数，以后常用 $\chi_i^{(\mu)}$ 表示在 (μ) 表象中 i 类的特征标.

在群 G 的各种等价表示中，如果存在幺正表示，那自然选幺正表示最方便. 但是并不是所有群的所有表示都等价于幺正表示，不过对有限群及常用的一些李群(见第五章)，可以证明它们的每一个表示都等价于一幺正表示. 因此除非特别声明我们以后只讨论幺正表示.

§2.9 表示的直和，可约表示与不可约表示 IR

由群 G 的两个表示 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ (维数分别为 h_1 和 h_2)，容易得到下面一个 h_1+h_2 维新表示[1)]

$$D(R)=\left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(R) & 0 \\ \hline 0 & D^{(2)}(R)\end{array}\right), \tag{2-91}$$

称表示 D 为 $D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$ 的直和，记为

$$D=D^{(1)}\oplus D^{(2)}. \tag{2-92}$$

显然直和表示的特征标

$$\chi(R)=\chi^{(1)}(R)+\chi^{(2)}(R). \tag{2-93}$$

反之，若对给定表示 $D(G)$，能找到一个相似变换，使 g 个矩阵 $D(R)$ 同时以同样的方式取准对角形式，则称表示 $D(G)$ 为可约表示[2)]. 例如若

$$TD(R_a)T^{-1}=\left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(R_a) & 0 \\ \hline 0 & D^{(2)}(R_a)\end{array}\right)\begin{matrix}\}\,h_1\\ \}\,h_2,\end{matrix}\qquad a=1,\ 2,\ \cdots,\ g \tag{2-94}$$

则说表示 $D(G)$ 可约化成两个表示 $D^{(1)}(G)$ 和 $D^{(2)}(G)$ 的直和，

$$D=D^{(1)}\oplus D^{(2)}.$$

可约表示的另一个等价定义是：如果在表示空间 L 中，我们能找到两个(或两个以上)

---

1) 利用准对角矩阵相乘规则

$$D(R)D(S)=\left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(R)D^{(1)}(S) & 0 \\ \hline 0 & D^{(2)}(R)D^{(2)}(S)\end{array}\right)$$

即可知 $D(R)$ 构成一个表示.

2) 更确切地说，这里所谓可约指完全可约，另一种所谓不完全可约是指经过相似变换只能把 $D(G)$ 变成以下形式：

$$TD(R_a)T^{-1}=\left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(R_a) & A(R_a) \\ \hline 0 & D^{(2)}(R_a)\end{array}\right)$$

见 §5.12.

子空间 $L^{(1)}$, $L^{(2)}$，它在群 G 作用下是不变的[1]，则说表示空间 L 是可约的，它可约化成两个子空间 $L^{(1)}$ 和 $L^{(2)}$ 的直和

$$L = L^{(1)} \oplus L^{(2)} \tag{2-95}$$

相应的表示也是可约的

$$D = D^{(1)} \oplus D^{(2)}$$

否则称该表示(或表示空间)是不可约的．换言之群 G 的最小不变子空间称为群 G 的不可约空间．不可约空间的基矢称为群 G 的不可约基．

习　　题

1．证明以上两种定义是等价的．

例 1． R_2 群．

(2-60b)式给出以 $\varphi_1 = x$, $\varphi_2 = y$ 为基时 R_2 的表示，这个两维表示是可约表示，可约化成两个一维表示的直和．为此只需将表示的基底作如下线性变换(至于如何找这种线性变换，就是群表示论要解决的一个主要问题)

$$\varphi_1' = \frac{-1}{\sqrt{2}}(x+iy) = rY_{11}(\theta, \varphi), \quad \varphi_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy) = rY_{1-1}(\theta, \varphi). \tag{2-96}$$

对照(2-30)式得矩阵

$$B = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}. \tag{2-97}$$

于是以(2-96)式为基时 R_2 的矩阵表示为

$$D'(\varphi) = B^* D(\varphi) \tilde{B} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}. \tag{2-98}$$

这里利用了(2-32)式和(2-60b)式．这样原来的两维表示就约化成了两个一维表示，两维表示空间 (φ_1, φ_2) 变成了两个一维子空间 (φ_1') 和 (φ_2') 的直和．

习　　题

1．若将(2-52)式中的基 φ_1, φ_2, φ_3 作以下变换

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{6}} & -\sqrt{\frac{1}{6}} \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{2}} & -\sqrt{\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{pmatrix}. \tag{2-99}$$

则 S_3 的三维表示(2-54)式约化为一个一维和一个两维表示的直和，求出约化后的表示矩阵．

回到(2-94)式．若群 G 的表示 $D(G)$ 已经取(2-94)式准对角形式，则我们称表示 $D(G)$ 取已约形式．现在进一步研究表示 $D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$ 是否进一步可约．由于每个子空间可独立地处理，因此 $D^{(1)}$ 和 $D^{(2)}$ 可分别讨论．例如以下形式的变换

$$T' = \left(\begin{array}{c|c} T_1' & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \} h_1 \\ \} h_2 \end{array} \tag{2-100}$$

1) 对完全可约表示只要在 L 中找到 G 的一个不变子空间 $L^{(1)}$，则剩下的空间 $L^{(2)}$ 也一定是 G 的不变子空间．

仅变换 $D^{(1)}$ 而不影响 $D^{(2)}$. 适当选择 T_1', 使 $D^{(1)}(G)$ 准对角化, 继续这个过程, 直至把表示 $D(G)$ 完全约化成一系列不可约表示的直和

$$D(R)=\begin{pmatrix} D^{(\nu_1)}(R) & & \\ & D^{(\nu_2)}(R) & \\ & & \ddots \end{pmatrix}, \tag{2-101}$$

$$D(R)=\sum_i \oplus D^{(\nu_i)}=D^{(\nu_1)}\oplus D^{(\nu_2)}\oplus\cdots. \tag{2-102}$$

这里 $D^{(\nu_i)}$ 为 h_{ν_i} 维不可约表示, $h=\sum_i h_{\nu_i}$. 可约表示空间 L 也相应地分解成一系列不可约空间的直和

$$L=\sum_i \oplus L_{\nu_i}=L_{\nu_1}\oplus L_{\nu_2}\oplus\cdots \tag{2-103a}$$

这些不可约表示 $D^{(\nu_i)}$ 中可能有互相等价的, 等价的表示可视为同一表示. 因此可约表示 D 中可能包含某一不可约表示 $D^{(\nu)}$ 不止一次, 设为 τ_ν 次. 于是(2-102)式可改写为

$$D=\sum_\nu \oplus\tau_\nu D^{(\nu)}. \tag{2-103b}$$

式中只对不等价的不可约表示 ν 求和. 由(2-93)式和(2-103b)式可得到可约表示的特征标用不可约表示特征标展开的公式

$$\chi_i=\sum_\nu \tau_\nu\chi_i^{(\nu)}. \tag{2-103c}$$

这里 $\chi_i^{(\nu)}=T_r(D^{(\nu)})$ 称为不可约特征标或素(primitive)特征标, $D^{(\nu)}$ 称为不可约矩阵.

如果一个表示 $D(G)$ 已分解成(2-101)式那样的形式, 其中对角线上的任一方块都是群 G 的一个不可约表示, 则我们说表示 $D(G)$ 取*完全已约形式*.

由于一个可约表示可以分解成一些维数较低的(或者说较简单的)不可约表示之和, 因此寻求群 G 的表示问题就归结为找出群 G 的所有的不等价的不可约表示.

下面讨论如何将一个可约表示约化. 为此先证明一个定理.

定理 1. 若 C 为和群 G 所有元素都对易的(简称为和群 G 对易的)一个算符, 则 C 的本征空间 L_ν 为群 G 的表示空间.

根据假设

$$[C,\ R_a]=0,\quad a=1,\ \cdots,\ g. \tag{2-104}$$

令 $\psi^{(\nu)}$ 为 L_ν 中任一矢量, 根据本征空间的定义(2-41)式有

$$C\psi^{(\nu)}=\nu\psi^{(\nu)}, \tag{2-105a}$$

$$CR_a\psi^{(\nu)}=R_aC\psi^{(\nu)}=\nu R_a\psi^{(\nu)}\quad a=1,\ \cdots,\ g. \tag{2-105b}$$

因此 $R_a\psi^\nu$ 仍为 C 的本征矢量, 本征值仍为 ν, 因此 $R_a\psi^\nu\in L_\nu$, 即 L_ν 为群 G 的不变子空间, 或说 L_ν 构成群 G 的一个表示空间.

若群 G 的一个表示空间 L 分解成 C 的 k 个本征空间: $L=\sum_{\nu=1}^{k}\oplus L_\nu$, 则表示 D 相应地分解成 k 个表示的直和

$$D=\sum_{\nu=1}^{k}\oplus D^{(\nu)}. \tag{2-106}$$

§2.10 舒尔引理

舒尔引理 1. 若 C 为与群 G 对易的算符，则群 G 的不可约空间必为 C 的本征空间.

我们用反证法：若群 G 的不可约空间 L_ν 可分解为 C 的两个本征空间的直和，$L_\nu=L_1\oplus L_2$，$CL_1=\lambda_1 L_1$，$CL_2=\lambda_2 L_2$. 则根据 § 2.9 节定理 1 可知，L_ν 必可分解成群 G 的两个表示空间，这与 L_ν 为不可约相矛盾，因此唯一的可能是 $CL_\nu=\lambda^\nu L_\nu$. 换言之，群 G 的不可约空间必为 C 的本征空间.

假定 $\psi_1^{(\nu)}\cdots\psi_{h_\nu}^{(\nu)}$ 为不可约空间 L_ν 的基矢，舒尔引理 1 告诉我们

$$C\psi_i^{(\nu)}=\lambda^{(\nu)}\psi_i^{(\nu)},\quad i=1,\ 2,\ \cdots h_\nu, \tag{2-107}$$

$$\langle\psi_i^{(\nu')}|C|\psi_j^{(\nu)}\rangle=\delta_{\nu\nu'}D_{ij}^{(\nu)}(C)=\delta_{\nu\nu'}\delta_{ij}\lambda^{(\nu)}. \tag{2-108}$$

由此可知，和群 G 对易的算符 C 的不可约表示矩阵为单位矩阵的 $\lambda^{(\nu)}$ 倍，$\lambda^{(\nu)}$ 为 C 的本征值.

舒尔引理的另一种表述为：

舒尔引理 2. 若矩阵 $D(R)$ 为群 G 的不可约表示，A 为和 $D(R)$ 同阶的一个矩阵且满足

$$AD(R)=D(R)A,\ \text{对所有}\ R\in G, \tag{2-109}$$

则 $A=\text{const.}\,\mathrm{I}$.

换言之，若一个矩阵和群 G 的一个不可约表示的所有矩阵都对易，则该矩阵为单位矩阵的某个倍数.

证明：我们在不可约空间解 A 的本征方程

$$A\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}.$$

由(2-109)式可知 $D(R)\boldsymbol{x}$ 仍为 A 的本征矢量，本征值仍为 λ. 因此 A 的本征空间为群 G 的不变子空间，即为群 G 的表示空间. 这意味着 D 为可约表示除非这个不变子空间是整个不可约空间或是一个零空间. 第一种可能性意味着在此空间 A 只有一个本征值，即 $A=\lambda\cdot 1$，而第二种可能性意味着 $A=0$，证毕.

由此得到一个表示不可约性的判据：如果和一个表示的所有矩阵都对易的矩阵只能是单位矩阵的某个倍数，则该表示必为不可约.

因此可以这样来证明一个表示 D 的不可约性：先找出满足(2-109)的矩阵 A，然后证明 A 为单位矩阵的一个倍数.

注意，舒尔引理 1 的逆定理不成立. 我们只能肯定，和群 G 对易的算符 C 的本征空间必定是群 G 的表示空间，但一般说它是可约的. 因此前一节利用 C 的本征空间来分解群表示的方法并没有告诉我们如何找出群 G 的不可约表示，传统群表示论中也没有提到用解本征函数来求群 G 的不可约基的. 我们下面的主要工作在于把定理 1 中的一个算符 C 扩大为一个完备算符集 $\bar{C}$($\bar{C}$ 中所有的算符都和 G 对易)，使得 $\bar{C}$ 的本征空间构成群 G 的不可约空间，这样就把求群的不可约表示问题化到量子力学中将完备算符集同时对角化的问题.

§2.11 附录：非正交归一基

对非正交归一基 $|\varphi_i\rangle$，要注意以下几点

1. 算符表示矩阵的两种定义

a. 群表示论中的定义.

若算符 R 对非正交归一基 $|\varphi_i\rangle$ 的作用可表为

$$R|\varphi_i\rangle=\sum_j D_{ji}(R)|\varphi_j\rangle. \tag{2-110a}$$

仍然定义 R 的表示矩阵为 $D(R)$, 但要注意, 现在(2-47)式不再成立, 而应改为

$$D_{ji}(R)=\langle\bar{\varphi}_j|R|\varphi_i\rangle, \tag{2-110b}$$

$|\bar{\varphi}_i\rangle$ 为(2-15)式定义的 dual 基. 由定义式(2-15)立即可知

$$|\bar{\varphi}_j\rangle=\sum_k(g^{-1})_{kj}|\varphi_k\rangle. \tag{2-111}$$

只要知道了 R 对 $|\varphi_i\rangle$ 的作用(2-110 a)式, 就可知道矩阵元 $D_{ji}(R)$. 因此实际上我们根本不必求出 dual 基 $|\bar{\varphi}_i\rangle$. 引进 $|\bar{\varphi}_i\rangle$ 仅仅为了数学表述的需要.

根据(2-15)式容易证明按(2-110b)定义的表示矩阵满足群表示要求(2-45). 证明如下: 由 $RR^{-1}=1$, 得

$$\sum_j\langle\bar{\varphi}_i|R|\varphi_j\rangle\langle\bar{\varphi}_j|R^{-1}|\varphi_k\rangle=\langle\bar{\varphi}_i|\varphi_k\rangle=\delta_{ik},$$

$$\therefore\quad D(R^{-1})=D^{-1}(R). \tag{2-112}$$

此外

$$\langle\bar{\varphi}_i|RS|\varphi_k\rangle=\sum_j\langle\bar{\varphi}_i|R|\varphi_j\rangle\langle\bar{\varphi}_j|S|\varphi_k\rangle, \tag{2-113a}$$

$$\langle\bar{\varphi}_i|e|\varphi_j\rangle=\langle\bar{\varphi}_i|\varphi_j\rangle=\delta_{ij}. \tag{2-113b}$$

故(2-45)式成立

b. 量子力学表象理论中的定义

定义算符 R 的表示矩阵为 $\mathscr{D}(R)$

$$\mathscr{D}_{ji}(R)=\langle\varphi_j|R|\varphi_i\rangle. \tag{2-114}$$

利用(2-13b)得

$$\langle\varphi_i|RS|\varphi_l\rangle=\sum_{jk}\langle\varphi_i|R|\varphi_j\rangle(g^{-1})_{jk}\langle\varphi_k|S|\varphi_l\rangle,$$

即

$$\mathscr{D}(RS)=\mathscr{D}(R)g^{-1}\mathscr{D}(S). \tag{2-115a}$$

由(2-13a)式得

$$\langle\varphi_i|e|\varphi_j\rangle=\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle=g_{ij},$$

即

$$\mathscr{D}(e)=g. \tag{2-115b}$$

令(2-115a)式中 $S=R^{-1}$, 并利用(2-115b)式得

$$g=\mathscr{D}(R)g^{-1}\mathscr{D}(R^{-1}).$$

于是

$$\mathscr{D}(R^{-1})=g\mathscr{D}^{-1}(R)g. \tag{2-115c}$$

由(2-115)式看到, 按量子力学定义的表示(2-114)式, 不满足群表示要求(2-45)式.

c. 两种表示矩阵的关系

(2-110 a)式左乘 $\langle\varphi_k|$ 得到 $\mathscr{D}$ 和 D 的关系

$$\mathscr{D}(R)=gD(R). \tag{2-116}$$

2. 厄米共轭算符的表示矩阵

a. 利用(2-110)式得

$$\langle\varphi_i|R^\dagger|\varphi_k\rangle=\langle\varphi_i|\sum_j D_{jk}(R^\dagger)\varphi_j\rangle=\sum_j g_{ij}D_{jk}(R^\dagger)$$

$$=\langle R\varphi_i|\varphi_k\rangle=\langle\sum_j D_{ji}(R)\varphi_j|\varphi_k\rangle=\sum_j D^*_{ji}(R)g_{jk}.$$

$$gD(R^\dagger)=\tilde{D}^*(R)g,$$

$$D(R^\dagger)=g^{-1}\tilde{D}^*(R)g. \tag{2-117}$$

因此 $D(R^\dagger)\neq D^\dagger(R)=\tilde{D}^*(R)$. 于是在定义(2-110b)下自轭算符 A 的表示矩阵不再是厄米矩阵,而满足以下式子:

$$D(A)=g^{-1}\tilde{D}^*(A)g. \tag{2-118}$$

b. 在定义(2-114)下,显然有

$$\mathscr{D}(R^\dagger)=\mathscr{D}^\dagger(R)=\tilde{\mathscr{D}}^*(R). \tag{2-119}$$

于是,自轭算符 A 的表示矩阵仍为厄米矩阵: $\mathscr{D}(A^\dagger)=\mathscr{D}^\dagger(A)$.

3. 幺正算符的表示矩阵

a. 由 $R^\dagger=R^{-1}$ 得

$$D(R^\dagger)=D(R^{-1}). \tag{2-120a}$$

由(2-112)、(2-117)式得

$$D(R^\dagger)=D(R^{-1})=D^{-1}(R)=g^{-1}\tilde{D}^*(R)g. \tag{2-121a}$$

因此 $D^{-1}(R)\neq\tilde{D}^*(R)$,即 $D(R)$一般说不再是幺正矩阵. 但也有可能仍然是幺正矩阵,具体例子见§8.7.

b. 由 $R^\dagger=R^{-1}$ 得

$$\mathscr{D}(R^\dagger)=\mathscr{D}(R^{-1}). \tag{2-120b}$$

再利用(2-119)和(2-115c)式得

$$\mathscr{D}(R^\dagger)=\tilde{\mathscr{D}}^\dagger(R)=\mathscr{D}(R^{-1})=g\mathscr{D}^{-1}(R)g. \tag{2-121b}$$

因此 $\mathscr{D}^\dagger(R)\neq\mathscr{D}^{-1}(R)$, 即 $\mathscr{D}(R)$一般说也不再是幺正矩阵.

4. 表象变换

a. 若取新基底 $|\varphi_i'\rangle$ (见(2-30)式),对应的 dual 基为

$$|\bar{\varphi}_i'\rangle=\sum_j a_{ij}|\bar{\varphi}_j\rangle. \tag{2-122}$$

容易证明,为了使新基底仍满足正交关系 $\langle\bar{\varphi}_j'|\varphi_i'\rangle=\delta_{ij}$, 必须要求

$$A=(B^\dagger)^{-1} \tag{2-123a}$$

若 B 为实矩阵,则

$$A=\tilde{B}^{-1}. \tag{2-123b}$$

也就是说,这种情形下, $|\varphi_i\rangle$ 为共变基矢,而 $|\bar{\varphi}_i\rangle$ 为逆变基矢. 例子见§10.7.

同一个算符 R 在新表象中的矩阵表示为

$$D'_{ji}(R)=\langle\bar{\varphi}_j'|R|\varphi_i'\rangle. \tag{2-124}$$

将(2-30)和(2-122)式代入上式,立即得到新老矩阵表示的关系

$$D'(R)=A^*D(R)\tilde{B}=\tilde{B}^{-1}D(R)\tilde{B}. \tag{2-125}$$

这里利用了(2-123a)式. 如果令 $\tilde{B}=T^{-1}$, 则得到大家熟悉的表象变换公式

$$D'(R)=TD(R)T^{-1}. \tag{2-126}$$

若表象变换矩阵 B 为幺正矩阵, 则(2-30)式称为幺正变换. 不难证明(1)一组正交归一基在幺正变换下必变到另一组正交归一基. (2) 两组正交归一基之间的变换一定是幺正变换

(3) 正交归一基到非正交归一基的变换必定不是幺正变换.

b．容易得到新、老度规张量的关系:

$$g'_{il} = \langle \varphi'_i | \varphi'_l \rangle = \sum_{jk} b^*_{ij} g_{jk} b_{lk},$$

即

$$g' = B^* g \widetilde{B}. \tag{2-127}$$

类似地可证

$$\mathscr{D}'(R) = B^* \mathscr{D}(R) \widetilde{B}. \tag{2-128}$$

5. 自轭算符的本征矢量

现在我们要将非正交归一基 $|\varphi_b\rangle$ 线性组合成算符 C 的本征矢量

$$C|\psi_\lambda\rangle = \lambda |\psi_\lambda\rangle, \tag{2-129}$$

$$|\psi_\lambda\rangle = \sum_b u_{\lambda b} |\varphi_b\rangle. \tag{2-130}$$

这可以在两种表示定义[(2-110b)和(2-114)式]下进行.

a．将(2-130)式代入(2-129)式,然后左乘 $\langle\bar{\varphi}_a|$, 并利用(2-15a)、(2-110b)式得

$$\sum_b (D_{ab}(C) - \lambda\delta_{ab}) u_{\lambda b} = 0. \tag{2-131}$$

即形式上和正交归一基时的本征方程(2-36)完全一样. 因此只要把 C 的表示矩阵 $D(C)$ 对角化就能解出本征矢量 $|\psi_\lambda\rangle$.

假定 C 为自厄算符,则可以证明属于不同 λ 的本征矢量仍满足正交性:

$$\langle\psi_{\lambda'}|C|\psi_\lambda\rangle = \lambda\langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle = \langle C\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle = \lambda'\langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle$$

即

$$(\lambda - \lambda')\langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle = 0 \tag{2-132}$$

因此当 $\lambda \neq \lambda'$ 时, $\langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle = 0$. 选择归一系数,可使 $|\psi_\lambda\rangle$ 归一.

假定 C 为空间 L 的 CSCO, 则每个 λ 都不相同. $|\psi_\lambda\rangle$ 仍满足正交、归一、完备性(2-44a, b)式, 但(2-44c, d)式不再成立. 将(2-130)代入(2-44a)式,得到正交归一性:

$$\sum_{ab} u^*_{\lambda a} g_{ab} u_{\lambda' b} = \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{2-133a}$$

定义

$$v_{\lambda a} = \sum_b g_{ab} u_{\lambda b}, \tag{2-134}$$

于是(2-133a)可写成

$$\sum_a v^*_{\lambda a} u_{\lambda' a} = \delta_{\lambda\lambda'}. \tag{2-133b}$$

(2-130)式左乘 $\langle\varphi_a|$ 得

$$\langle\varphi_a|\psi_\lambda\rangle = \sum_b g_{ab} u_{\lambda b} = v_{\lambda a}. \tag{2-135}$$

将(2-44b)左乘 $\langle\bar{\varphi}_c|$, 右乘 $|\varphi_b\rangle$, 并利用(2-130)和(2-135)式,得到完备性:

$$\sum_\lambda v^*_{\lambda b} u_{\lambda c} = \delta_{bc}. \tag{2-136a}$$

再利用(2-134)式,上式可写成

$$\sum_{\lambda a} u^*_{\lambda a} g_{ab} u_{\lambda c} = \delta_{bc}. \tag{2-136b}$$

在 $|\psi_\lambda\rangle = \sum_c u_{\lambda c}|\varphi_c\rangle$ 的左右两边都乘以 $v^*_{\lambda b}$, 并对 λ 求和,同时利用(2-136a)式,就得到非正交归一基 $|\varphi_b\rangle$ 用正交归一基 $|\psi_\lambda\rangle$ 的展开式

$$|\varphi_b\rangle = \sum_\lambda v^*_{\lambda b}|\psi_\lambda\rangle = \sum_{\lambda a} u^*_{\lambda a} g_{ab} |\psi_\lambda\rangle. \tag{2-137a}$$

上式为(2-130)式的逆展开. (2-136)表明, 从非正交归一基 $|\varphi_b\rangle$ 到正交归一基 $|\psi_\lambda\rangle$ 的变

换 u 不是一个幺正变换.

后面有时还会用到正交但不归一的基 $|\varphi_a\rangle$, 即度规张量 $g_{ab}=g_a\delta_{ab}$, 这时正交归一完备性(2-136)简化为:

$$\sum_a g_a u_{\lambda a}^* u_{\lambda' a}=\delta_{\lambda\lambda'},$$
$$\sum_\lambda g_a u_{\lambda a}^* u_{\lambda b}=\delta_{ab}. \qquad (2\text{-}138)$$

而 duel 基

$$|\bar{\varphi}_a\rangle=(g_a)^{-1}|\varphi_a\rangle=(\langle\varphi_a|\varphi_a\rangle)^{-1}|\varphi_a\rangle. \qquad (2\text{-}139)$$

b. 将算符 C 作用在(2-130)式

$$\sum_b (C-\lambda)|\varphi_b\rangle u_{\lambda b}=0. \qquad (2\text{-}140a)$$

上式左乘 $\langle\varphi_a|$ 得

$$\sum_b (\mathscr{D}_{ab}(C)-\lambda g_{ab})u_{\lambda b}=0. \qquad (2\text{-}140b)$$

写成矩阵形式为

$$(\mathscr{D}(C)-\lambda g)\boldsymbol{u}_\lambda=0. \qquad (2\text{-}140c)$$

上式等价于本征方程

$$(g^{-1}\mathscr{D}(C)-\lambda\cdot I)\boldsymbol{u}_\lambda=0, \quad 或 \quad (g^{-1/2}\mathscr{D}(C)g^{-1/2}-\lambda I)\boldsymbol{u}_\lambda=0 \qquad (2\text{-}141)$$

由(2-116)式知 $g^{-1}\mathscr{D}(C)=D(C)$. 因此(2-141)式和(2-131)式完全一致. 即无论定义算符 C 的表示矩阵为 $D(C)$ 或 $\mathscr{D}(C)$, C 的本征矢量是相同的, 这是理所当然的.

对于正交归一基, $|\bar{\varphi}_a\rangle=|\varphi_a\rangle$, $\mathscr{D}=D$, 以上讨论的两者之间的差别全部消失, 这就回到正文中所讨论的情形.

本书以后**一律**按(2-110b)式定义算符的表示矩阵.

最后谈一个有趣的看法. 由(2-137a)即

$$|\varphi_a\rangle=\sum_\lambda v_{\lambda a}^*|\psi_\lambda\rangle \qquad (2\text{-}137a)$$

以及(2-111)和(2-134)式, 可知

$$|\bar{\varphi}_a\rangle=\sum_\lambda u_{\lambda a}^*|\psi_\lambda\rangle. \qquad (2\text{-}137b)$$

可以把 $|\varphi_a\rangle$ 看成一个由非自厄算符构成的 CSCO$\mathscr{O}$ 的本征矢量, 对应的本征值为 γ_a

$$\mathscr{O}|\varphi_a\rangle=\gamma_a|\varphi_a\rangle, \qquad (2\text{-}142a)$$

则 $|\varphi_a\rangle$ 的 dual 基 $|\bar{\varphi}_a\rangle$ 为厄米共轭算符 $\mathscr{O}^\dagger$ 的本征矢量, 对应的本征值为 γ_a 之复数共轭

$$\mathscr{O}^\dagger|\bar{\varphi}_a\rangle=\gamma_a^*|\bar{\varphi}_a\rangle. \qquad (2\text{-}142b)$$

为此只需证明(2-142a, b)的解满足 $\langle\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle=\delta_{ab}$. 证明如下:

$$\langle\bar{\varphi}_a|\mathscr{O}|\varphi_b\rangle=\gamma_b\langle\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle=\langle\mathscr{O}^\dagger\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle=\gamma_a\langle\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle.$$
$$(\gamma_a-\gamma_b)\langle\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle=0.$$

因此归一化后, 我们有 $\langle\bar{\varphi}_a|\varphi_b\rangle=\delta_{ab}$.

定义列向量

$$\boldsymbol{u}_\lambda=\mathrm{col}(u_{\lambda a},\ u_{\lambda b},\ \cdots), \quad \boldsymbol{v}_a=\mathrm{col}(v_{\lambda a}^*,\ v_{\lambda' a}^*,\ \cdots)$$
$$\bar{\boldsymbol{v}}_a=\mathrm{col}(u_{\lambda a}^*,\ u_{\lambda' a}^*,\ \cdots).$$

显见, $\boldsymbol{u}_\lambda$ 为自厄算符 C 的本征矢量 $|\psi_\lambda\rangle$ 在非正交归一基 $\{\varphi_a\}$ 上的表示, 而 $\boldsymbol{v}_a(\bar{\boldsymbol{v}}_a)$为非自厄算符 $\mathscr{O}(\mathscr{O}^\dagger)$ 的本征矢量 $|\varphi_a\rangle(|\bar{\varphi}_a\rangle)$ 在正交归一基 $\{\psi_\lambda\}$ 上的表示. 于是, (2-133a)、(2-136b)式为 $\boldsymbol{u}_\lambda$ 的正交归一完备性, 而(2-133b)、(2-136a)式可视为 $\boldsymbol{v}_a(\bar{\boldsymbol{v}}_a)$的"正交归一完备性". 换言之, (2-133)和(2-136)式既可视为自厄算符 C 的本征矢量的正交归一完备性, 又可视为非自厄算符 $\mathscr{O}$ 的本征矢量的"正交归一完备性".

第三章　有限群表示论

本章将系统地介绍有限群表示的新理论．在讲述这一新理论时，有两条道路可供选择：1．第一条是顺着这一理论形成的原始过程，那就是按书上现成的次序，以置换群 S_3 为引导，由此最终导致 § 3.9 的有限群表示的一般理论．这一条路的优点是较富有启发性，它使我们看到群 G 一个可约表示的约化是如何跟量子力学中消除简并紧密相连的，因此比较容易为初学者所接受；缺点是从数学上讲不够漂亮，篇幅上也不够经济．如果着眼于数学上的严格和完美，我们可走第二条道路：2．从 § 3.3 定理 3a 后，立刻跳到 § 3.7，§ 3.8 和 § 3.9，然后再回过头去看 § 3.3 中的定理 4 和定理 5，这样定理 4 和定理 5 就不证自明了．

读者可根据自己的需要，任选一条道路．

§ 3.1　类空间和类代数

1．类算符

同一类的所有群元算符之和称为类算符．若 i 类包含 g_i 个群元 $R_1^{(i)}, \cdots, R_{g_i}^{(i)}$，则 i 类类算符为

$$C_i = \sum_{l=1}^{g_i} R_l^{(i)}, \quad i=1, 2, \cdots, N. \tag{3-1}$$

后面有时要用到所谓平均类算符 C^i

$$C^i = C_i / g_i. \tag{3-2}$$

注意，群元算符 R 为幺正算符．但类算符 C_i 不一定是幺正算符．

类算符有以下三个重要性质：

a．类算符和群 G 所有元素都对易，

$$[C_i, R_a] = 0, \quad a=1, 2, \cdots, g. \tag{3-3}$$

证明：用群元 R_a 对类算符 C_i 作共轭运算，结果只是把类算符中的元素重新排列一下，即有

$$R_a C_i R_a^{-1} = \sum_{l=1}^{g_i} R_a R_l^{(i)} R_a^{-1} = \sum_{l'=1}^{g_i} R_{l'}^{(i)} = C_i. \tag{3-4}$$

因此(3-3)式成立．

b．类算符互相对易

$$[C_i, C_j] = 0. \tag{3-5}$$

由(3-3)式立即得到上式．

c．两个类算符的积(按群的乘法规则定义)必可表为 N 个类算符的线性组合，

$$C_i C_j = \sum_{k=1}^{N} C_{ij}^k C_k. \tag{3-6a}$$

证明：根据

$$\sum_{a=1}^{g} R_a R_l^{(i)} R_a^{-1} = \sum_{a=1}^{g} R_a (R_b R_l^{(i)} R_b^{-1}) R_a^{-1} = \sum_{a=1}^{g} R_a R_{l'}^{(i)} R_a^{-1},$$

可知上式中，i 类的所有元素都是处于等价地位的，因此

$$\sum_{a=1}^{g} R_a C_i R_a^{-1} = g_i \sum_{a=1}^{g} R_a R_i^{(i)} R_a^{-1}.$$

由(3-4)式及上式得

$$C_i = \frac{g_i}{g} \sum_{a=1}^{g} R_a R_i^{(i)} R_a^{-1}, \tag{3-6b}$$

或写成

$$\sum_{a=1}^{g} R_a R_i^{(i)} R_a^{-1} = \frac{g}{g_i} C_i. \tag{3-6c}$$

另一方面由(3-4)式容易证明：

$$C_i C_j = \frac{1}{g} \sum_{a=1}^{g} R_a (C_i C_j) R_a^{-1}. \tag{3-6d}$$

根据(3-6c)式，若(3-6d)式右方包含 k 类的某一个元素，如 $R_l^{(k)}$，则它必包含整个 k 类，于是(3-6a)式得证.

由(3-6a)左右两边元素数目相等，得到

$$g_i g_j = \sum_{k=1}^{N} C_{ij}^k g_k. \tag{3-6e}$$

在§3.3中，我们将看到，C_{ij}^k 决定了群的不可约表示，因此我们将 C_{ij}^k 称为有限群结构常数. 由类算符的可对易性质，立即知道 C_{ij}^k 对下指标 i, j 为对称，

$$C_{ij}^k = C_{ji}^k. \tag{3-7}$$

由于类算符的上述三个重要性质，使得类算符在决定群 G 的不可约表示时起着极其重要的作用.

2. 类代数

群 G 有 N 个类，它的 N 个类算符 $\{C_i\}$ 张开一个 N 维线性空间，称为类空间 L_c. 因为 $\{C_i\}$ 是 g 维群空间 L_g 中的一些特殊矢量，所以类空间 L_c 是群空间 L_g 的一个子空间. 在 L_c 中任一矢量 Q 可表为基矢 C_i 的线性组合，

$$Q = \sum_{i=1}^{N} q_i C_i = \sum_{i=1}^{N} q(C_i) C_i, \tag{3-8}$$

$q_i = q(C_i)$ 为复数. L_c 中两个矢量之和定义为

$$Q^{(\nu)} + Q^{(\mu)} = \sum_{i=1}^{N} (q_i^{(\nu)} + q_i^{(\mu)}) C_i \quad \in L_c. \tag{3-9}$$

又因类空间 L_c 是群空间 L_g 的子空间，所以 L_c 中的度规 g_{ij} 由群空间度规(2-73)式决定. 由(2-73)式和(3-1a)式得

$$\langle C_i | C_j \rangle = \mathrm{g}_{ij} = g_i \delta_{ij}, \tag{3-10}$$

g_i 为 i 类中包含的群元个数. 由上式看到，$\{C_i\}$ 为正交但不归一的基矢. 于是 L_c 中两个矢量的标量积为：

$$\langle Q^{(\nu)} | Q^{(\mu)} \rangle = \sum_i g_i q_i^{(\nu)*} q_i^{(\mu)}. \tag{3-11}$$

我们进一步还可按(3-6a)式定义类空间中任意两个矢量的乘积

$$Q^{(\nu)} Q^{(\mu)} = \sum_i q_i^{(\nu)} C_i \sum_j q_j^{(\mu)} C_j = \sum_{ijk} (q_i^{(\nu)} q_j^{(\mu)} C_{ij}^k) C_k \quad \in L_c. \tag{3-12}$$

由(3-9)式和(3-12)式可见，$\{Q^{(\nu)}\}$ 在线性组合和乘法下为封闭，因此类算符 $\{C_i\}$ 构成一个代数，称为类代数，它是群代数的一个子代数.

3. 类上函数空间

(3-8)式中 N 个复数

$$q=(q_1, q_2, \cdots, q_N)=(q(C_1), q(C_2), \cdots, q(C_N)) \tag{3-13}$$

可看作矢量 Q 在基 C_i 上的坐标，构成一个 N 维矢量. 我们也可把它看成定义在类上的一个函数. 对不连续群，它是一个弥散函数，只在 N 个'点' $C_1, C_2, \cdots, C_N$ 上有定义值. $q(C_i)$ 的全体构成一个 N 维空间，称为类上函数空间，它和类空间是一对一的映射. 和(3-11)式类似，定义类上函数空间中两个矢量 $q^{(\nu)}$ 和 $q^{(\mu)}$ 的标量积为

$$\langle q^{(\nu)}|q^{(\mu)}\rangle=\sum_{i=1}^{N} g_i q^{(\nu)*}(C_i)q^{(\mu)}(C_i). \tag{3-14}$$

4. 类代数的自然表示

群代数中，群元既是算符又是基矢，g 个群元构成群 G 的正则表示. 类似地，类代数中类算符 C_i 既是算符又是基矢，N 个 C_i 构成类代数的一个表示，不妨称它为类代数的自然表示. 类似于(2-76)式有

$$\hat{C}_i C_j=C_i C_j=\sum_k D_{kj}(C_i)C_k. \tag{3-15a}$$

或写成

$$C_i\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\ \vdots\\C_N\end{pmatrix}=\tilde{D}(C_i)\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\ \vdots\\C_N\end{pmatrix}. \tag{3-15b}$$

由(3-6a)式可知，类算符 $\hat{C}_i$ 的自然表示矩阵为

$$D_{kj}(C_i)=C_{ij}^{k}. \tag{3-16}$$

前面我们说过没有必要去区分 $\hat{R}$ 和 R，这里也没有必要区分 $\hat{C}_i$ 和 C_i，因此以后我们也不再区分 $\hat{C}_i$ 和 C_i.

例 1 S_3 群

由(1-20)式得到 S_3 群的三个类算符

$$C_1=e, \quad C_2=(12)+(13)+(23), \quad C_3=(123)+(132). \tag{3-17}$$

根据 S_3 群的乘法表容易算出类算符的乘法表

表 3.1 S_3 群类算符乘法表

$C_i \backslash C_iC_j \backslash C_j$	C_1	C_2	C_3
C_1	C_1	C_2	C_3
C_2	C_2	$3(C_1+C_3)$	$2C_2$
C_3	C_3	$2C_2$	$2C_1+C_3$

由(3-7)式可知，上表相对于对角线为对称. 由(3-16)式及表 3.1 可得到 S_3 类算符的自然表示[1)]

1) 由于 (C_1, C_2, C_3) 不是归一基，所以自轭算符 C_2, C_3 的表示矩阵不是厄米矩阵，而满足(2-118)式.

$$D(C_1)=\begin{pmatrix}1&&0\\&1&\\0&&1\end{pmatrix},\ D(C_2)=\begin{pmatrix}0&3&0\\1&0&2\\0&3&0\end{pmatrix},\ D(C_3)=\begin{pmatrix}0&0&2\\0&2&0\\1&0&1\end{pmatrix}. \tag{3-18}$$

例 2 S_4 群.

由 S_4 群的 5 个类(1-21)式，得到 5 个类算符

$$\begin{aligned}&C_1=e,\ C_2=\sum_{j>i=1}^{4}(ji),\ C_3=\sum_{k>j>i=1}^{4}[(ijk)+(ikj)],\\&C_4=(1234)+(1243)+(1324)+(1342)+(1423)+(1432),\\&C_5=(12)(34)+(13)(24)+(14)(23).\end{aligned} \tag{3-19}$$

作出 C_2 和这 5 个类算符的乘积，得

$$C_2\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\\C_5\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0&0&0\\6&0&3&0&2\\0&4&0&4&0\\0&0&3&0&4\\0&1&0&2&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\\C_5\end{pmatrix}. \tag{3-20a}$$

上式右方矩阵的转置就是类算符 C_2 的自然表示

$$D(C_2)=\begin{pmatrix}0&6&0&0&0\\1&0&4&0&1\\0&3&0&3&0\\0&0&4&0&2\\0&2&0&4&0\end{pmatrix}. \tag{3-20b}$$

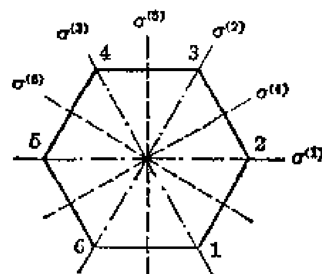


图 3.1 $\mathscr{C}_{6v}$ 群

例 3 $\mathscr{C}_{6v}$ 群.

$\mathscr{C}_{6v}$ 群是正六边形的对称群(见图 3.1). 它有 12 个元素(详见第八章)，其中有六个转动 $C_6^n=R(2n\pi/6)$，$n=1,2,\cdots,6$，和六个反射面 $\sigma^{(1)},\cdots,\sigma^{(6)}$. 这儿 $C_6=R(2\pi/6)$ 代表逆时针转 $2\pi/6$ 弧度，而 $(C_6)^6\equiv C_6^6=e$. 将六边形顶点如图 3.1 所示编上号码，利用 § 1.4 例 1 中所讲的方法，容易找到这 12 个群元所对应的置换算符，此即

$$\begin{array}{cccccc}e & C_6 & C_6^2 & C_6^3 & C_6^4 & C_6^5\\ e, & (123456), & (135)(246), & (14)(25)(36), & (153)(264), & (165432).\\ \sigma^{(1)} & \sigma^{(2)} & \sigma^{(3)} & \sigma^{(4)} & \sigma^{(5)} & \sigma^{(6)}\\ (13)(46), & (15)(24), & (26)(35), & (14)(23)(56), & (16)(25)(34), & (12)(36)(45).\end{array} \tag{3-21}$$

由此可见，$\mathscr{C}_{6v}$ 群和 S_6 群的一个子群同构. $\mathscr{C}_{6v}$ 群共有六个类，类算符为

$$\begin{aligned}&C_1=e,\ C_2=C_6^3,\quad C_3=C_6^2+C_6^4,\quad C_4=C_6^1+C_6^5,\\&C_5=\sigma^{(1)}+\sigma^{(2)}+\sigma^{(3)},\qquad C_6=\sigma^{(4)}+\sigma^{(5)}+\sigma^{(6)}.\end{aligned} \tag{3-22}$$

由于(3-21)式的同构关系，我们可用置换群乘法得出 $\mathscr{C}_{6v}$ 类算符的乘法，例如可得到

$$C_4\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\\C_5\\C_6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_4\\C_3\\2C_2+C_4\\2C_1+C_3\\2C_6\\2C_5\end{pmatrix},\quad C_5\begin{pmatrix}C_1\\C_2\\C_3\\C_4\\C_5\\C_6\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_5\\C_6\\2C_5\\2C_6\\3C_1+3C_3\\3C_2+3C_4\end{pmatrix}. \tag{3-23}$$

由此可写下 C_4 和 C_5 的自然表示 $D(C_4)$和 $D(C_5)$。

§3.2 群 G 的第一类完备算符集(CSCO-I)

§2.9 定理 1 告诉我们，可以利用和群 G 对易的算符 C 将群 G 的表示约化. 从前一节我们又知道，群 G 的所有类算符都和群 G 对易. 因此我们可以选类算符 C_i 作为 C，把群 G 的表示空间按 C_i 的本征空间分解，这样也就把群 G 的表示空间进行了约化. 令 L_{λ_i} 为 C_i 的本征空间，则有

$$C_i L_{\lambda_i} = \lambda_i L_{\lambda_i}, \quad L = \sum_{\lambda_i} \oplus L_{\lambda_i}. \tag{3-24}$$

但前面讲过，L_{λ_i} 还可能是可约的，我们可再选一个类算符如 C_j，将空间 L_{λ_i} 进一步按 C_j 的本征空间分解：

$$C_j L_{\lambda_i\lambda_j} = \lambda_j L_{\lambda_i\lambda_j}. \tag{3-25}$$

$$L_{\lambda_i} = \sum_{\lambda_j} \oplus L_{\lambda_i\lambda_j}, \quad L = \sum_{\lambda_i\lambda_j} \oplus L_{\lambda_i\lambda_j}. \tag{3-26}$$

显然 $L_{\lambda_i\lambda_j}$ 仍然是 C_i 的本征空间，本征值为 λ_i，因此 $L_{\lambda_i\lambda_j}$ 是算符 C_i 和 C_j 的共同本征空间. 每一个子空间 $L_{\lambda_i\lambda_j}$ 给出群 G 的一个表示，如此继续下去，直到每个子空间都不能进一步约化为止. 现在自然要提出这样的问题，算符 C_i, C_j, ⋯ 应如何选取才能做到这一点？此外一个群究竟有哪些不可约表示？为了解决这些问题，我们先在类空间讨论，即先解决类代数 $\{C_i\}$ 的不可约表示问题[1].

1. 类代数自然表示的约化

一个群的 N 个类算符构成类代数自然表示的基. 类代数的自然表示 $D_{kj}(C_i) = C_{ij}^k$ 是一个 N 维可约表示，我们要把它约化成不可约表示. 因为 N 个类算符互相对易，所以 N 个矩阵 $D_{kj}(C_i)$, $i=1, 2, \cdots, N$，可同时对角化，因此类代数的自然表示必可分解成 N 个一维(自然是不可约的)表示的直和.

我们首先假定群 G 的所有类算符都为自厄算符. 更一般的情形见第 4 小节.

为此我们在 N 个算符中选一个算符，如 C_{i_1}[2]，在类空间中，求 C_{i_1} 的本征矢量 Q

$$C_{i_1} Q = \lambda_{i_1} Q. \tag{3-27a}$$

$$Q = \sum_{j=1}^{N} q_j C_j. \tag{3-27b}$$

这等价于把矩阵 $D(C_{i_1})$对角化，由(2-36)和(3-16)式可得

$$\sum_{j=1}^{N} (C_{i_1 j}^k - \lambda_{i_1} \delta_{jk}) q_j = 0, \quad k = 1, 2, \cdots, N. \tag{3-28}$$

该方程组有解的条件为(对照(2-37)式)

$$\det \| C_{i_1 j}^k - \lambda_{i_1} \delta_{jk} \| = \prod_{\nu=1}^{n} (\lambda_{i_1} - \lambda_{i_1}^{\nu})^{M_\nu} = 0. \tag{3-29}$$

1) 类算符 C_1, C_2, ⋯, C_N 并不构成一个群，但同样可定义它们的不可约表示，即定义所有类算符作用下的最小的不变子空间为它的不可约空间.

2) 自然不能选幺元素 e 作为 C_{i_1}，因它对应于单位矩阵，所以总是对角化的.

这里 M_ν 为本征值(特征根) $\lambda_{i_1}^\nu$ 的重数(简并度). 若(3-29)式有 N 个不同的本征值, 即所有的简并度 $M_\nu=1$, 则 C_{i_1} 构成 N 维类空间的 CSCO, 对应于它的每一个本征值 $\lambda_{i_1}^\nu$, 由(3-28)式可求出唯一的解(除归一常数外) $q^{(\nu)}=(q_1^{(\nu)}, \cdots, q_N^{(\nu)})$. 代入(3-27b)式就得到 C_{i_1} 的本征矢量 $Q^{(\nu)}$

$$Q^{(\nu)}=\sum_j q_j^{(\nu)} C_j. \tag{3-27c}$$

容易证明它必定是所有其余类算符的本征矢量,证明如下:

由(3-5)式和(3-27a)式得

$$C_{i_1}(C_j Q^{(\nu)})=C_j C_{i_1} Q^{(\nu)}=\lambda_{i_1}^\nu (C_j Q^{(\nu)}).$$

上式表明, $C_j Q^{(\nu)}$ 仍为 C_{i_1} 的本征矢量,本征值为 $\lambda_{i_1}^\nu$. 又因一个 $\lambda_{i_1}^\nu$ 只对应一个 $Q^{(\nu)}$, 所以

$$C_j Q^{(\nu)}=\text{const}\, Q^{(\nu)}=\lambda_j^\nu Q^{(\nu)}. \tag{3-30}$$

证毕.

于是这样求得的 N 个本征矢量 $Q^{(\nu)}$ 构成类代数的 N 个一维不可约基, 采用这套基时, N 个类算符全取对角矩阵形式. 用表象理论的术语讲,我们已把 N 个类算符从非对角表象同时变到了对角表象

$$D(C_i)=\begin{pmatrix} C_{i_1}^1 & \cdots & C_{iN}^1 \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots \\ C_{i_1}^N & \cdots & C_{iN}^N \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \lambda_i^{\nu_1} & & 0 \\ & \lambda_i^{\nu_2} & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \lambda_i^{\nu_N} \end{pmatrix}. \tag{3-31}$$

若某一特征值 $\lambda_{i_1}^{(\mu)}$ 为 $M_\mu>1$ 重根,则算符 C_{i_1} 并不构成类空间的 CSCO, 对于此 $\lambda_{i_1}^\mu$, 解不能唯一确定, 由(3-28)式可解得 M_μ 个线性独立解 $Q_1^{(\mu)}, \cdots, Q_{M_\mu}^{(\mu)}$, 它们构成 C_{i_1} 的一个 M_μ 维本征空间 L_μ. 这时我们可以再找一个类算符, 例如 C_{i_2}, 将 $Q_1^{(\mu)}, \cdots, Q_{M_\mu}^{(\mu)}$ 线性组合, 使之构成 C_{i_2} 的本征矢量. 换言之,将空间 L_μ 按 C_{i_2} 的本征空间进行分解, 依此类推, 直至找到类空间的一个完备算符集

$$C=(C_{i_1}, C_{i_2}, \cdots, C_{i_l}), \tag{3-32}$$

它们的共同本征空间都是一维的. 它们的共同本征矢量 $Q^{(\nu)}$ 满足 l 个联立本征方程

$$\begin{pmatrix} C_{i_1} \\ \vdots \\ C_{i_l} \end{pmatrix} Q^{(\nu)}=\begin{pmatrix} \lambda_{i_1}^\nu \\ \vdots \\ \lambda_{i_l}^\nu \end{pmatrix} Q^{(\nu)}. \tag{3-33a}$$

我们可简洁地用一个方程来代表上式:

$$CQ^{(\nu)}=\lambda^{(\nu)} Q^{(\nu)}, \tag{3-33b}$$

$$\lambda^{(\nu)}=(\lambda_{i_1}^\nu, \lambda_{i_2}^\nu, \cdots, \lambda_{i_l}^\nu).$$

$Q^{(\nu)}$ 构成类代数不可约表示的基.

注意,对于 C_{i_1} 的单根 $\lambda_{i_1}^\nu$, 只要一个本征值 $\lambda_{i_1}^\nu$ 就足以唯一确定一个 $Q^{(\nu)}$ 了, 这时除 C_{i_1} 外,其余类算符的本征方程都是多余的.

2. 群 G 的 CSCO-I

定义 1 若由 l 个类算符构成的一个算符集 $C=(C_{i_1}, C_{i_2}, \cdots, C_{i_l})$ 为类空间的 CSCO, 则称 C 为群 G 的第一类 CSCO, 记为 CSCO-I, 简称为群 G 的 CSCO.

以下我们讨论有限群完备算符集的存在性问题. 首先证明构成完备算符集的类算符个数 l 必定小于等于类数目 N, 也就是要证明算符集 $(C_1, C_2, \cdots, C_N)$ 必定构成 CSCO-I,

表 8.2-1 $n\leqslant 10$ 的置换群 S_n 不可约表示的标志

S_2	[2]
$\lambda_{(2)}$	1

S_3	[3]	[21]
$\lambda_{(2)}$	3	0

S_4	[4]	[31]	[22]
$\lambda_{(2)}$	6	2	0

S_5	[5]	[41]	[32]	[31^2]
$\lambda_{(2)}$	10	5	2	0

S_6	[6]	[51]	[42]	[41^2]	[33]	[321]
$\lambda_{(2)}$	15	9	5	3	3	0
$\lambda_{(3)}$			4	−8		

S_7	[7]	[61]	[52]	[51^2]	[43]	[421]	[3^{2}1]	[41^3]
$\lambda_{(2)}$	21	14	9	7	6	3	1	0

S_8	[8]	[71]	[62]	[61^2]	[53]	[521]	[51^3]	[4^2]	[431]	[42^2]	[4211]	[3^{2}2]
$\lambda_{(2)}$	28	20	14	12	10	7	4	8	4	2	0	0
$\lambda_{(3)}$							16		−8		0	−16

S_9	[9]	[81]	[72]	[71^2]	[63]	[621]	[61^3]	[54]	[531]	[52^2]	[521^2]	[4^{2}1]	[432]	[431^2]	[51^4]	[3^3]
$\lambda_{(2)}$	36	27	20	18	15	12	9	12	8	6	4	6	3	1	0	0
$\lambda_{(3)}$						24		0							24	−24

S_{10}	[10]	[91]	[82]	[81^2]	[73]	[721]	[71^3]	[64]	[631]	[62^2]	[621^2]	[61^4]	[5^2]	[541]	[532]	[531^2]	[52^{2}1]	[4^{2}2]	[4^{2}1^2]	[43^2]	[4321]	[521^3]
$\lambda_{(2)}$	45	35	27	25	21	18	15	17	13	11	9	5	15	10	7	5	3	5	3	3	0	0
$\lambda_{(3)}$							60					40	0			0	0	−20	−12	−24	−15	15

注 1. 我们把标志置换群 S_n 的两种方法列在表上，以便对照．第一行是传统用的配分$[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots]$，见 § 4.1 (以下几点说明可暂先不看，学到第四章时再来看)．第二、三行是 S_n 的二循环、三循环类算符的本征值 $\lambda_{(2)}^{[\nu]}$, $\lambda_{(3)}^{[\nu]}$．这二者的关系为(见(7-38d))：

$$\lambda_{(2)}^{[\nu]}=\frac{n}{2}+\frac{1}{2}\sum_l \nu_l(\nu_l-2l)\qquad \lambda_{(3)}^{[\nu]}=\frac{1}{3}\left\{2n-\frac{3}{2}n^2+\sum_l \nu_l\left[\nu_l^2-\left(3l-\frac{3}{2}\right)\nu_l+3l(l-1)\right]\right\}$$

2. 本征值 $\lambda_{(i)}^{[\nu]}$ 和特征标 $\chi_{(i)}^{[\nu]}$ 的关系为 $\lambda_{(i)}^{[\nu]}=\dfrac{g_{(i)}}{h_\nu}\chi_{(i)}^{[\nu]}$, h_ν 为 $IR(\nu)$ 的维数， $g_{(i)}$ 为 i 循环类中包含的元素数 $g_{(i)}=\binom{n}{i}(i-1)!$

3. 表上只有在 $\lambda_{(2)}^{[\nu]}$ 为重根时才列出了 $\lambda_{(3)}^{[\nu]}$　4. 由于关系式(4-3b)，和 $IR[\nu]$ 相共轭的表示$[\tilde{\nu}]$对应于本征值 $\lambda_{(2)}^{[\tilde{\nu}]}=-\lambda_{(2)}^{[\nu]}$, $\lambda_{(3)}^{[\tilde{\nu}]}=\lambda_{(3)}^{[\nu]}$，为了节省篇幅表中只列出了 $\lambda_{(2)}^{[\nu]}\geqslant 0$ 的部分。

即它必有 N 套不同的本征值. 为此我们把 C_i 在对角化表象中的表示看作一个列向量, 把 N 个列向量排成一个方阵 M:

$$M=\begin{pmatrix} \lambda_1^{\nu_1} & \lambda_2^{\nu_1} & \cdots & \lambda_N^{\nu_1} \\ \lambda_1^{\nu_2} & \lambda_2^{\nu_2} & \cdots & \lambda_N^{\nu_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda_1^{\nu_N} & \lambda_2^{\nu_N} & \cdots & \lambda_N^{\nu_N} \end{pmatrix}. \tag{3-34}$$

由于 N 个类算符 C_i 是线性独立的,所以矩阵M中 N 个列向量为线性独立, 故M的秩为 N. 因此它的 N 个行矢量 $(\lambda_1^{\nu_i}, \lambda_2^{\nu_i}, \cdots, \lambda_N^{\nu_i})$, $i=1, 2, \cdots, N$, 也必为线性独立. 这样就证明了算符集$(C_1, C_2, \cdots, C_N)$一定有 N 套不同的本征值集.

由此可知,对任一有限群 G, 总可找到一个完备算符集,从而把类空间分解成 N 个一维本征空间的直和. 显然群 G 的 CSCO 的选取不唯一, 实用上我们总是希望 CSCO 中所包含的算符个数 l 尽可能地少. 但是要指出 CSCO 的不同的选取丝毫不影响结果.

对于一个不知道其不可约特征标的群,可用前面试探方法找到 CSCO–I, 但对已知不可约特征标的群(绝大多数有限群的特征标都为已知), 则可利用 § 3.12 方法非常方便地找到 CSCO–I. 对置换群还可利用(4–3a)式方便地找到 CSCO. 置换群和点群的 CSCO–I 分别列在表 3.2–1 和表 8.3 中. 由表 3.2–1 看到置换群 S_2–S_5 和 S_7, 都只要一个二循环类算符 $C_{(2)}$ 就构成 CSCO–I 了, S_6 和 S_8–S_{14} (表 3.2–1 中只列到 S_{10} 为止) 群要两个类算符 $C=(C_{(2)}, C_{(3)})$($C_{(3)}$ 为三循环类算符)才构成 CSCO–I. 由表 8.3 看到,对于所有三十二种点群, 最多只要三个类算符就构成 CSCO–I. 由此可见,构成群 G CSCO–I 的类算符个数 l 远小于类数N, 正是这一事实使得本征函数法有很大的实用价值.

不难证明,如果 $(C_1, \cdots, C_l)$ 构成群 G 的 CSCO–I, 则总可以找到这 l 个算符的一个线性组合

$$C=k_1C_1+\cdots+k_lC_l \tag{3-35}$$

使得一个算符 C 构成群 G 的 CSCO–I.

若已知 $C_1, C_2, \cdots, C_l$ 的所有本征值 $\lambda_1^\nu, \lambda_2^\nu, \cdots, \lambda_l^\nu$, 则容易找到常数 $k_1, k_2, \cdots, k_l$, 使得 $\lambda=\sum_{i=1}^{l} k_i\lambda_i$ 具有 N 个不同的本征值. 将这些 k_i 代入(3–35), 就找到了由一个算符构成的 CSCO.

例如对于 S_6 群,如果选

$$C=C_{(2)}+3C_{(3)}, \tag{3-36}$$

则 C 有 11 个不同的本征值 $\lambda=\lambda_{(2)}+3\lambda_{(3)}$ (见表 3.2–2), 因为 S_6 群的类数 $N=11$, 所以 C 为 S_6 的 CSCO–I.

表 3.2–2 $(C_{(2)}+3C_{(3)})$一个算符构成 S_6 群的 CSCO–I

配分 \ λ	[6]	[51]	[42]	[411]	[33]	[321]	[222]	$[31^3]$	$[2^21^2]$	$[21^4]$	$[1^6]$
$\lambda_{(2)}$	15	9	5	3	3	0	−3	−3	−5	−9	−15
$\lambda_{(3)}$	40	16	0	4	−8	−5	−8	4	0	16	40
$3\lambda_{(3)}+\lambda_{(2)}$	135	57	5	15	−21	−15	−27	9	−5	39	105

以后我们既可以把群 G CSCO-I 理解成 l 个类算符构成的一个算符集(3-32)，也可以把它理解成这 l 个算符组成的有 N 个不同本征值的一个算符(3-35)式，于是联立本征方程(3-33b)式也可看作为一个算符 C 的本征方程，$\lambda^{(\nu)}$ 为 C 的一个本征值.

3. 直积群 $G_1\times G_2$ 的 CSCO-I

若 G_1, G_2 群各有 N_1 和 N_2 个类，它们的 CSCO-I 分别为 $C^{(1)}$ 和 $C^{(2)}$，则直积群 $G_1\times G_2$ 有 N_1N_2 个类．容易看出算符集

$$C=(C^{(1)},\ C^{(2)}) \tag{3-37}$$

在 $G_1\times G_2$ 群的 N_1N_2 维类空间中有 N_1N_2 套不同的本征值$(\lambda^{(1)},\ \lambda^{(2)})$，因此 $C=(C^{(1)},\ C^{(2)})$ 为 $G_1\times G_2$ 群的 CSCO-I，例子见 § 8.3.

4. 一般情形

以上讨论中，我们假定了群 G 所有的类算符都是自厄算符．因此群 G 的 CSCO-I 也全由自厄算符所组成．对于一般情形，我们有

引理：在将类代数自然表示约化时，任何有限群 G 的 N 个类算符必等价于 N 个自厄算符.

设群 G 有 n_1 个 ambivalent 类，类算符为 $C_1,\ \cdots,\ C_{n_1}$，和 $2n_2$ 个非 ambivalent 类，类算符为

$$C_i=\sum_{l=1}^{g_i} R_l^{(i)},\quad C_{i'}=\sum_{l=1}^{g_i}(R_l^{(i)})^{-1},\quad i=n_1+1,\ \cdots,\ n_1+n_2. \tag{3-38}$$

$N=n_1+2n_2$．利用群算符均为幺正算符

$$(R_l^{(i)})^{-1}=(R_l^{(i)})^{\dagger}$$

这一性质，立即可知 ambivalent 类算符 $C_1,\ \cdots,\ C_{n_1}$ 为自厄算符，而非 ambivalent 类算符满足

$$C_{i'}=C_i^{\dagger},\quad i=n_1+1,\ \cdots,\ n_1+n_2. \tag{3-39}$$

我们可以将 $2n_2$ 个非 ambivalent 类算符重新组合成 $2n_2$ 个自厄算符

$$K_j=C_l+C_{l'},\ K'_j=i(C_l-C_{l'}), \tag{3-40}$$

$$j=l-n_1,\ l=n_1+1,\ \cdots,\ n_1+n_2. \tag{3-41}$$

因此求 N 个类算符 $(C_1,\ C_2,\ \cdots,\ C_N)$ 的共同本征矢量就等价于求 N 个自厄算符 $(C_1,\ \cdots,\ C_{n_1},\ K_1,\ \cdots,\ K_{n_2},\ K'_1,\ \cdots,\ K'_{n_2})$ 的本征矢量．引理证毕.

由上述引理可知，任何有限群 G 的 CSCO-I 都等价于一个全由自厄算符构成的完备算符集．因此前面第 1, 2 小节的讨论对任何有限群都成立，而量子力学中关于完备算符集的所有定理或结论都可搬到群表示论中来．以后在叙述一般定理时，为了方便起见，我们一律认为群 G 的 CSCO-I 为自厄算符集.

例如，对循环群 $a,\ a^2,\ a^3,\ a^4=e$，除幺元素外，任一个元素(亦即类算符)都构成这个群的 CSCO-I．若选 a 为 CSCO-I，其本征值为 $1,\ i,\ -i$ 和 -1．若选$((a+a^{-1}),\ -i(a-a^{-1}))$ 为 CSCO-I，则本征值全为实数 $((2,\ 0),\ (0,\ 2),\ (0,\ -2),\ (0,\ 0))$．我们也可选 $2(a+a^{-1})-i(a-a^{-1})$为 CSCO-I，它的本征值为$(4,\ 2,\ -2,\ 0)$．这三种完备算符集自然都是等价的.

由于 C 等价于自厄算符，因此 C 的本征矢量 $Q^{(\nu)}$ 满足正交归一完备性

$$\langle Q^{(\nu)}|Q^{(\mu)}\rangle=\delta_{\nu\mu},\qquad \sum_{\nu}|Q^{(\nu)}\rangle\langle Q^{(\nu)}|=1. \tag{3-42}$$

由(3-11)式得

$$\sum_{i=1}^{N} g_i q_i^{(\nu)*} q_i^{(\mu)} = \delta_{\nu\mu}. \tag{3-43a}$$

由完备性得到

$$\sum_{\nu} \langle C_i | Q^{(\nu)} \rangle \langle Q^{(\nu)} | C_j \rangle = g_i \delta_{ij}.$$

即

$$\sum_{\nu=1}^{N} g_i q_i^{(\nu)*} q_j^{(\nu)} = \delta_{ij}. \tag{3-43b}$$

(3-43)式可和(2-138)式相对照.

5. 例子：S_3 群和 $\mathscr{C}_{6v}$ 群

例 1 S_3 群类代数自然表示的完全分解.

(3-18)式给出了 S_3 群类代数的自然表示，我们先将类算符 C_2 的自然表示矩阵对角化，得到三个本征值 $\lambda=3,\ 0,\ -3$，全没有简并，因此 C_2 构成 S_3 群的 CSCO-I. C_2 的三个本征矢量为

$$\begin{aligned}
&\lambda=3, \quad Q^{(3)}=\sqrt{\frac{1}{6}}(C_1+C_2+C_3), \\
&\lambda=0, \quad Q^{(0)}=\sqrt{\frac{1}{6}}(2C_1-C_3), \\
&\lambda=-3, \quad Q^{(-3)}=\sqrt{\frac{1}{6}}(C_1-C_2+C_3).
\end{aligned} \tag{3-44a}$$

归一条件由(3-43a)式决定(注意 $g_1=1,\ g_2=3,\ g_3=2$). 容易验证上式三个解满足完备性条件(3-43b).

在以 $Q^{(3)}$, $Q^{(0)}$ 和 $Q^{(-3)}$ 为基矢的表示空间，类算符 C_1, C_2 和 C_3 的表示矩阵为

$$\mathscr{D}(C_1)=\begin{pmatrix}1 & & 0\\ & 1 & \\ 0 & & 1\end{pmatrix},\quad \mathscr{D}(C_2)=\begin{pmatrix}3 & & 0\\ & 0 & \\ 0 & & -3\end{pmatrix},\quad \mathscr{D}(C_3)=\begin{pmatrix}2 & & 0\\ & -1 & \\ 0 & & 2\end{pmatrix}. \tag{3-44b}$$

可见他们全都取完全已约形式.

例 2 $\mathscr{C}_{6v}$ 群.

由(3-23)式可得到类算符 C_4 的自然表示矩阵

$$D(C_4)=\left(\begin{array}{cccc|cc}
0 & 0 & 0 & 2 & & \\
0 & 0 & 2 & 0 & & \\
0 & 1 & 0 & 1 & \multicolumn{2}{c}{0} \\
1 & 0 & 1 & 0 & & \\
\hline
\multicolumn{4}{c|}{0} & 0 & 2 \\
 & & & & 2 & 0
\end{array}\right) \tag{3-45}$$

它是一准对角矩阵，可分别对角化，得到以下四个不同的本征值和六个本征矢量

$$\begin{aligned}
&\lambda_4=-1, \quad Q^{(-1)}=\sqrt{\frac{1}{12}}(2C_1+2C_2-C_3-C_4), \\
&\lambda_4=1, \qquad Q^{(1)}=\sqrt{\frac{1}{12}}(2C_1-2C_2-C_3+C_4),
\end{aligned} \tag{3-46}$$

$$\lambda_4=2\ (\text{二重根}),\ Q_1=C_1+C_2+C_3+C_4,\ Q_2=C_5+C_6, \tag{3-47}$$
$$\lambda_4=-2\ (\text{二重根}),\ Q_3=C_1-C_2+C_3-C_4,\ Q_4=C_5-C_6.$$

这里 $Q^{(\pm1)}$ 满足归一性(3-43a)．容易验证，C_4 单根的解 $Q^{(-1)}$ 和 $Q^{(1)}$ 也是 C_5 的本征矢量，本征值 λ_5 都为零．因 $\lambda_4=\pm2$ 为二重根，C_4 不构成 CSCO． 我们进一步将 C_4 的本征空间 $(Q_1,\ Q_2)$ 和 $(Q_3,\ Q_4)$ 按 C_5 的本征空间分解，即求解本征方程

$$C_5(b_1Q_1+b_2Q_2)=\lambda_5(b_1Q_1+b_2Q_2),\ C_5(b_3Q_3+b_4Q_4)=\lambda_5(b_3Q_3+b_4Q_4). \tag{3-48}$$

利用(3-23)式和(3-47)式可得到 C_5 对 $Q_1\cdots Q_4$ 的作用，解上述本征方程即可找到以下四个解

$$\begin{aligned}
(\lambda_4,\ \lambda_5)=(2,\ 3),\ \ Q^{(2,3)}&=\sqrt{\frac{1}{12}}(Q_1+Q_2)=\sqrt{\frac{1}{12}}(C_1+C_2+C_3+C_4+C_5+C_6),\\
(2,\ -3),\ \ Q^{(2,-3)}&=\sqrt{\frac{1}{12}}(Q_1-Q_2)=\sqrt{\frac{1}{12}}(C_1+C_2+C_3+C_4-C_5-C_6),\\
(-2,\ 3),\ \ Q^{(-2,3)}&=\sqrt{\frac{1}{12}}(Q_3+Q_4)=\sqrt{\frac{1}{12}}(C_1-C_2+C_3-C_4+C_5-C_6),\\
(-2,\ -3),\ \ Q^{(-2,-3)}&=\sqrt{\frac{1}{12}}(Q_3-Q_4)=\sqrt{\frac{1}{12}}(C_1-C_2+C_3-C_4-C_5+C_6).
\end{aligned} \tag{3-49}$$

因此 $C=(C_4,\ C_5)$ 为 $\mathscr{C}_{6v}$ 的 CSCO-I．如果选

$$C=2C_4+C_5$$

则 C 有 6 个不同的本征值 $\lambda=(2\lambda_4+\lambda_5)=(7,\ 1,\ -1,\ -7,\ -2,\ 2)$，因此这一个算符就构成 $\mathscr{C}_{6v}$ 的 CSCO-I.

习　　题

1．将(3-20b)式对角化，求出 S_4 群类代数的不可约基 $Q^{(\nu)}$．

2．求出 $\mathscr{C}_{4v}$ 群的 CSCO-I 及其在类空间的本征矢量 $Q^{(\nu)}$.

§3.3　不可约表示投影算符 $P^{(\nu)}$

1．群空间按群 G 不等价的不可约表示空间进行分解

由(3-5)式和(3-27b)式知 C 和 $Q^{(\nu)}$ 对易，再利用(3-33b)式得：

$$C(Q^{(\nu)}Q^{(\mu)})=(CQ^{(\nu)})Q^{(\mu)}=\lambda^{(\nu)}(Q^{(\nu)}Q^{(\mu)})=Q^{(\nu)}(CQ^{(\mu)})=\lambda^{(\mu)}(Q^{(\nu)}Q^{(\mu)}).$$

因此

$$Q^{(\nu)}Q^{(\mu)}=\delta_{\nu\mu}\eta_\nu Q^{(\nu)}, \tag{3-50}$$

这里 η_ν 为一个只和 ν 有关的常数．令

$$P^{(\nu)}=\eta_\nu^{-1}Q^{(\nu)} \tag{3-51}$$

由(3-50)式和(3-51)式可得

$$P^{(\nu)}P^{(\mu)}=\delta_{\nu\mu}P^{(\nu)}. \tag{3-52}$$

数学上称满足(3-52)式的算符为等幂算符．

利用(3-43b)式可将(3-27b)式逆展开得

$$C_i=\sum_{\nu=1}^{N} g_i q_i^{(\nu)*} Q^{(\nu)}. \tag{3-53}$$

将(3-53)式右乘 $Q^{(\mu)}$，并利用(3-50)式得

$$\lambda_i^{(\nu)}=\eta_\nu g_i q_i^{(\nu)*}. \tag{3-54}$$

结合(3-51、53、54)式就有

$$C_i=\sum_{\nu=1}^{N} \lambda_i^{(\nu)} P^{(\nu)}. \tag{3-55}$$

令上式中 $C_i=e$，并注意到 $\lambda_e^{(\nu)}=1$，得到

$$e=\sum_{\nu=1}^{N} P^{(\nu)}. \tag{3-56}$$

此即幺元素分解公式，其意义见(3-60)式.

现在从 N 维类空间转到 g 维群空间 L_g 讨论问题. L_g 构成群 G 的正则表示空间.

定理 2a CSCO-I C 的本征算符 $P^{(\nu)}$ 把群空间 L_g 分解成 C 的 N 个互相正交的本征空间 L_ν 的直和，$P^{(\nu)}$ 为到 L_ν 的投影算符.

证明：因 $P^{(\nu)}$ 和 $Q^{(\nu)}$ 只差一个倍数，$P^{(\nu)}$ 自然是 CSCO-I 的本征算符

$$CP^{(\nu)}=\lambda^{(\nu)}P^{(\nu)}. \tag{3-57}$$

由上式可知

$$C(P^{(\nu)}R_a)=(CP^{(\nu)})R_a=\lambda^{(\nu)}(P^{(\nu)}R_a). \tag{3-58}$$

因此由集合 $\{P^{(\nu)}R_a\}$ $(R_a\in G)$ 构成的空间

$$L_\nu\equiv P^{(\nu)}L_g=\{P^{(\nu)}R_a\} \quad (R_a\in G) \tag{3-59}$$

是 C 的本征空间，对应的本征值为 $\lambda^{(\nu)}$. 由于 C 等价于自厄算符，因此当 $\nu\neq\mu$ 时，L_ν 中的任一矢量和 L_μ 中的任一矢量正交. 由(3-56)式又可得到：

$$L_g=eL_g=\sum_{\nu=1}^{N} P^{(\nu)}L_g=\sum_{\nu=1}^{N}\oplus L_\nu. \tag{3-60a}$$

因此群空间 L_g 被分解成了 N 个互相正交的本征空间的直和. 再根据 § 2.9 定理 1，本征空间 L_ν 必为群 G 的表示空间，$P^{(\nu)}$ 为到表示空间 L_ν 的投影算符，定理 $2a$ 证毕.

定理 2b 在群 G 的任一表示空间 $\mathscr{L}$ 中，群 G 的 CSCO-I 的本征值都不会超出在类空间中所决定的那 N 种.

证明：类似于(3-60a)，对任一表示空间 $\mathscr{L}$ 有

$$\mathscr{L}=e\mathscr{L}=\sum_{\nu=1}^{N} P^{(\nu)}\mathscr{L}=\sum_{\nu=1}^{N}\oplus\mathscr{L}_\nu \tag{3-60b}$$

如果 $\mathscr{L}_\nu$ 不是零空间，则 $\mathscr{L}_\nu$ 为 C 的本征空间，本征值为 $\lambda^{(\nu)}$. 此外假定 $\mathscr{L}_\mu$ 为 C 的本征空间，本征值 $\lambda^{(\mu)}\neq\lambda^{(\nu)}$，$\nu=1, 2, \cdots, N$. 由于属于不同本征值的本征空间互相正交，$\langle\mathscr{L}^{(\nu)}|\mathscr{L}^{(\mu)}\rangle=0$，$\nu=1, 2, \cdots, N$. 利用(3-60b)式，得到

$$\langle\mathscr{L}|\mathscr{L}^{(\mu)}\rangle=0.$$

由于 $\mathscr{L}$ 为任一表示空间，上式表明 $\mathscr{L}^{(\mu)}$ 只能是零空间. 定理 $2b$ 证毕.

定理 2c 群 G 的 CSCO-I 在群空间有，也只有由类空间中所决定的 N 种本征值.

定理 2c 是显然的. 因为类空间是群空间的子空间，群 G 的 CSCO-I 在类空间中有 N 种不同的本征值，它在群空间中至少应有这 N 种本征值. 而定理 $2b$ 又告诉我们，它在群空间也只有这 N 种本征值.

定理 3a 本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 不同的表示空间 $\mathscr{L}_\nu$ 一定不等价.

证明：若 $\mathscr{L}_\nu$ 和 $\mathscr{L}_{\nu'}$ 为群 G 的两个表示空间，对应于本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 和 $\lambda^{(\nu')}$，且 $\lambda^{(\nu)}\neq\lambda^{(\nu')}$. 我们用反证法. 假定 $\mathscr{L}_\nu$ 和 $\mathscr{L}_{\nu'}$ 给出群 G 的两个表示 $D^{(\nu)}$ 和 $D^{(\nu')}$ 为等价，则类算符 C_i 在这两个空间的矩阵表示必满足

$$D^{(\nu')}(C_i)=TD^{(\nu)}(C_i)T^{-1}. \tag{3-61}$$

而根据本征空间的定义，群 G CSCO-I 在 $\mathscr{L}_\nu$ 中的表示必为单位矩阵的一个倍数

$$D^{(\nu)}(C)=\lambda^{(\nu)}I, \tag{3-62a}$$

这里 I 为单位矩阵. 经过相似变换(3-61)式后，它保持不变，即

$$D^{(\nu')}(C)=\lambda^{(\nu)}I. \tag{3-62b}$$

因此若 $\mathscr{L}_\nu$ 和 $\mathscr{L}_{\nu'}$ 等价，则必有 $\lambda^{(\nu)}=\lambda^{(\nu')}$，和我们的假设相矛盾，于是定理得证.

应当指出，$\mathscr{L}_\nu$ 一般说是可约的，假定 $\mathscr{L}_\nu$ 可分解成 τ_ν 个不可约子空间的直和

$$\mathscr{L}_\nu=\mathscr{L}_{(\nu)1}\oplus\mathscr{L}_{(\nu)2}\oplus\cdots\oplus\mathscr{L}_{(\nu)\tau_\nu}. \tag{3-63}$$

于是在每一个 $\mathscr{L}_{(\nu)k}$ 上可建立一个不可约表示. 同样可证明下述定理

定理 3b $\lambda^{(\nu)}$ 不同的不可约空间 $\mathscr{L}_{(\nu)k}$ 一定不等价.

在 § 3.9 我们将证明，$\lambda^{(\nu)}$ 相同的不可约表示必互相等价(见(3-193b)式).

注意，投影算符 $P^{(\nu)}$ 仅将表示空间 $\mathscr{L}$ 中的任一矢量 Φ 投影到表示空间 $\mathscr{L}_\nu$，而没有明确投影到 τ_ν 个等价的不可约空间(3-63)式中的那一个. 以下我们称 $P^{(\nu)}$ 为到群 G 的 $IR(\nu)$ 的投影算符，并称 $P^{(\nu)}\Phi$ 属于群 G 的 $IR(\nu)$.

由前面定理 2, 3 看到，群 G 的正则表示空间必可分解成第一类完备算符集 C 的 N 个(N 为群 G 的类的数目)本征空间 L_ν，$\nu=1, 2, \cdots, N$，它们给出 N 个不等价的表示空间.

对于喜欢数学严格的读者，可直接跳到 § 3.7, § 3.8 和 § 3.9，然后再回过头来看以下的内容.

2. 不可约表示的标志

由于 C 的本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 唯一决定了投影算符 $P^{(\nu)}$，$P^{(\nu)}$ 又决定了不等价的表示空间 L_ν，因此可用 $\lambda^{(\nu)}$ 来唯一标志群 G 的不等价的不可约表示(ν). 由此我们得到一个重要结论：标志有限群 G 的不等价的不可约表示不需要 N 个特征标 $(\chi_1^\nu, \chi_2^\nu, \cdots, \chi_N^\nu)$，而只需要 CSCO-I 的一个本征值 $\lambda^{(\nu)}$. 以下我们既用 ν 代表本征值 $\lambda^{(\nu)}$，同时又用它标志不可约表示.

根据狄拉克给出的定理(Dirac 1958, § 19)，若一个线性算符和一完备算符集中的所有算符都对易，则该算符必为此完备算符集的函数[1]. 因此有

$$C_i=F_i(C). \tag{3-64}$$

于是 C_i 的本征值可表为一个算符 C 的本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 的函数

$$\lambda_i^{(\nu)}=F_i(\lambda^{(\nu)}). \tag{3-65}$$

现在来求 i 类类算符本征值 $\lambda_i^{(\nu)}$ 和 i 类特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 的关系. 由(3-1)式得

$$D^{(\nu)}(C_i)=\sum_{l=1}^{g_i}D^{(\nu)}(R_l^{(i)}). \tag{3-66}$$

根据在 $IR(\nu)$ 中，C_i 为单位矩阵的 $\lambda_i^{(\nu)}$ 倍，以及同一类元素的特征标相同，对上式求迹得

$$h_\nu\lambda_i^{(\nu)}=g_i\chi_i^{(\nu)}, \tag{3-67}$$

这里 h_ν 为(ν)不可约表示的维数[1]，因此

1) 文献[29]也证明了群 G 所有的类算符都可表为仅由一个算符组成的 CSCO-I 的函数.

$$\chi_i^{(\nu)}=\frac{h_\nu}{g_i}\lambda_i^{(\nu)}. \tag{3-68}$$

由(3-65)式和(3-68)式得

$$\chi_i^{(\nu)}=\frac{h_\nu}{g_i}F_i(\lambda^{(\nu)}). \tag{3-69}$$

这表明 N 个类的特征标都可表为 CSCO-I 的本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 和维数 h_ν 的函数. 由此可见要真正反映一个不可约表示的特征不需要 N 个特征标 $\chi_i^{(\nu)}$, 而只需要一个数 $\lambda^{(\nu)}$[1]. 山内恭彦曾经表示过这样的愿望"如果利用比特征标更简单的方法来决定不可约表示, 那当然更便利了". 可以说, 用 CSCO 的本征值是一种便利的方法.

下面举两个例子来验证(3-64)式.

例 1 S_3 群.

$$C=C_2=\sum_{i>j=1}^{3}(ij),\qquad C_3=\frac{1}{3}(C)^2-e. \tag{3-70}$$

例 2 S_4 群.

$$C=C_2=\sum_{i>j=1}^{4}(ij),\qquad C_3=-\frac{1}{48}(C)^4+\frac{13}{12}(C)^2-4e. \tag{3-71}$$

$$C_4=\frac{1}{16}(C)^3-\frac{5}{4}(C)^2,\qquad C_5=\frac{1}{32}(C)^4-\frac{9}{8}(C)^2+3e. \tag{3-72}$$

3. 群 G 任一表示空间按不等价的不可约空间进行分解

若空间 $\mathscr{L}$ 中某一矢量 $\psi^{(\nu)}$ 是群 G 的 CSCO-I 的本征函数,

$$C\psi^{(\nu)}=\nu\psi^{(\nu)}. \tag{3-73}$$

根据(3-60b), $\psi^{(\nu)}$ 必定属于表示空间 $\mathscr{L}_\nu$, 也就是说, $\psi^{(\nu)}$ 属于群 G 的 $IR(\nu)$.

反之, 如果 $\psi^{(\nu)}$ 为群 G 不可约基, 则根据舒尔引理, $\psi^{(\nu)}$ 必然是群 G 的所有类算符, 因而必然也是群 G 的 CSCO-I 的本征函数. 于是我们得到定理 4.

定理 4 $\psi^{(\nu)}$ 属于群 G 的 $IR(\nu)$ 的充要条件是 $\psi^{(\nu)}$ 为群 G 的 CSCO-I 的本征函数:

$$C\psi^{(\nu)}=\nu\psi^{(\nu)}.$$

定理 4 是群表示的本征函数法的基础, 它把求群 G 的不可约表示问题转化为大家所熟悉的求完备算符集的共同本征函数问题, 即变成把完备算符集 C 在可约基底 $\varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 上的矩阵表示对角化的问题. C 的本征函数可表为

$$\psi^{(\nu)}=\sum_{i=1}^{n}a_i\varphi_i. \tag{3-74}$$

本征值 ν 和 $\{a_i\}$ 由下面的矩阵方程决定

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ C_{n1} & C_{n2} & \cdots & C_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}=\nu\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \tag{3-75a}$$

$$C_{ij}=\langle\varphi_i|C|\varphi_j\rangle. \tag{3-76a}$$

有限群中我们经常遇到的情形(如置换群和大多数点群)是 C 为自厄算符, 并且矩阵元 C_{ij} 都为实数, 因此这时 $\|C_{ij}\|$ 为对称矩阵

1) 注意, 如果已知一个表示为 IR, 则光一个 $\lambda^{(\nu)}$ 就足以标志它的一切特征. 但如果不知道一个表示是否可约, 则光从 CSCO-I 的本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 不能判断它是否可约. (例如下面将看到, C 的本征空间 L_ν 是一个可约空间. 这时还必须进一步考虑该表示的维数 h, 如果 $h=\chi_e^{(\nu)}$, 则该表示为不可约.)

$$C_{ij}=C_{ji}=\langle\varphi_j|C|\varphi_i\rangle.\tag{3-76b}$$

由(3-75a)式和(3-76)式得到

$$\sum_j\langle\varphi_j|C|\varphi_i\rangle a_j=\nu a_i.\tag{3-75b}$$

后面经常要用到(3-75b)式，该式表明，要得到关于 a_i 的一个方程，只要知道 C 对 φ_i 态的作用(即求出 $C|\varphi_i\rangle$)就行了.

若群 G 有一子群链 $G\supset G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$，则定理 4 可推广成

定理 5 $\psi^{(\nu)}_{\lambda(s_1),\lambda(s_2),\cdots}$ 分别属于 $G\supset G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$ 群 $IR(\nu)$, $\lambda(s_1)$, $\lambda(s_2)$, …的充要条件为 $\psi^{(\nu)}_{\lambda(s_1),\lambda(s_2),\cdots}$ 满足联立本征方程

$$\begin{pmatrix}C\\C(s_1)\\C(s_2)\\\vdots\end{pmatrix}\psi^{(\nu)}_{\lambda(s_1),\lambda(s_2),\cdots}=\begin{pmatrix}\nu\\\lambda(s_1)\\\lambda(s_2)\\\vdots\end{pmatrix}\psi^{(\nu)}_{\lambda(s_1),\lambda(s_2),\cdots}\tag{3-77a}$$

这里 $C(s_i)$ 为 $G(s_i)$ 的 CSCO-I.

一般情况下，对应于一个 ν，可能有好几个不同的本征值 $\lambda(s_1)$，例如 $\lambda^{(1)}(s_1)$，…，$\lambda^{(n)}(s_1)$. 这意味着群 G 的 $IR(\nu)$ 相对于其子群 $G(s_1)$ 是可约的，它可约化成子群 $G(s_1)$ 的 n 个 $IR\,\lambda^{(1)}(s_1)$，…，$\lambda^{(n)}(s_1)$.

用记号 $G(s)$ 代表子群链 $G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$，$C(s)$ 代表算符集 $(C(s_1), C(s_2),\cdots)$. m 代表本征值集 $(\lambda(s_1), \lambda(s_2),\cdots)$. 于是定理 5 可简述为:

$\psi^{(\nu)}_m$ 属于 $G\supset G(s)$ 的 $IR\ (\nu, m)$ 的充要条件是 $\psi^{(\nu)}_m$ 满足本征方程:

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\end{pmatrix}\psi^{(\nu)}_m=\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\psi^{(\nu)}_m.\tag{3-77b}$$

我们称 $C(s)$ 为群链 $G(s)$ 的CSCO.

§3.4 S_2 和 S_3 群可约表示的约化

先看最简单的情形 S_2 群.

1. S_2 群

设有两个电子，一个自旋朝上(α)，一个自旋朝下(β)，此两电子系统共有两种可能的状态

$$\varphi_1=|\alpha\beta\rangle=\chi_\alpha(1)\chi_\beta(2),\quad \varphi_2=|\beta\alpha\rangle=\chi_\beta(1)\chi_\alpha(2)$$

它们构成 S_2 群的一个二维可约表示，也是 S_2 的正则表示. S_2 群的 CSCO 为 $C=(12)$，根据定理 4，S_2 群的不可约基应当满足本征方程

$$(12)\psi^{(\nu)}=\nu\psi^{(\nu)},\quad \psi^{(\nu)}=\sum_{i=1}^{2}a_i\varphi_i.$$

利用 $(12)\varphi_1=\chi_\alpha(2)\chi_\beta(1)=\varphi_2$，立刻求出 S_2 群的两个不可约基

$$\psi^{(1)}=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1+\varphi_2),\quad \psi^{(-1)}=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_2).\tag{3-78}$$

$\psi^{(1)}$ 对于交换电子的坐标编号 1, 2 为对称. 为了直观，传统置换群表示论中用记号 [1|2] 来标志这种态，即用两个并排的方块，从左到右填入 1, 2 两个数字. $\psi^{(-1)}$ 对于交换电子坐

标编号 1, 2 为反对称,用竖排的两个方块,并自上到下填入 1, 2 两个数字来标志,即

$$|\,\boxed{1}\boxed{2}\,\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1+\varphi_2),\quad \left|\,\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline\end{array}\,\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_2). \tag{3-79}$$

于是 S_2 群的正则表示约化成了两个不等价的不可约表示.

$\boxed{1}\boxed{2}$ 和 $\begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline\end{array}$ 称为杨盘,它的定义在下一章还要专门介绍.

2. S_3 群的 $\alpha^2\beta$ 组态

设有三个电子,两个自旋朝上,一个自旋朝下. 此三个电子系统在自旋空间共有三个可能的状态, 即表 3.4 中的 φ_1, φ_2 和 φ_3, 它们构成 S_3 群的一个三维可约表示. 可有两种办法将它约化: (1) 直接解本征方程(3-73)式或(3-75a)式. (2) 利用投影算符 $Q^{(\nu)}$.

(1) 直接法:

由 § 3.2 节知 S_3 群的 CSCO 为

$$C=C(3)=(12)+(23)+(13). \tag{3-80}$$

容易求出(12), (23), (13)对 φ_i 的作用,列在下表

表 3.4

$(ij)\varphi_i$ \ φ_i, (ij)	$\varphi_1=\lvert\alpha\alpha\beta\rangle$	$\varphi_2=\lvert\alpha\beta\alpha\rangle$	$\varphi_3=\lvert\beta\alpha\alpha\rangle$
(12)	φ_1	φ_3	φ_2
(23)	φ_2	φ_1	φ_3
(13)	φ_3	φ_2	φ_1

令待求的不可约基为 $\psi^{(\nu)}=a_1\varphi_1+a_2\varphi_2+a_3\varphi_3$. 由(3-75a), (3-80)式及表 3.4 得

$$\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}=\nu\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ a_3\end{pmatrix}. \tag{3-81}$$

注意将(2-54)式(12), (23)和(13)置换的矩阵表示相加, 也可得到完备算符集 C 的矩阵表示

$$D(C)=D(12)+D(23)+D(13)=\begin{pmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{pmatrix}.$$

因此实际上可不必通过上述步骤而直接利用(2-54)式导出本征方程(3-81). 这里不这样做的原因是采用列表(如表 3.4 那种形式的表)直接求 CSCO 的本征方程, 比先求出各个对换 (ij) 的矩阵表示再将它相加而得到 C 的矩阵表示更为简单, 对高维表示尤其如此 (见 § 4.6 节).

由(3-81)式容易解出 $\nu=3$ 为单根,对应唯一的一个解

$$\psi^{(3)}=\left|\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}(\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3) \tag{3-82}$$

它给出一个一维全对称表示，这里用杨盘 $\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}$ 代表对 1, 2, 3 为全对称的态．在 $\nu=3$ 的不可约表示中，S_3 群的 6 个置换的表示矩阵都等于 1，即 $D(R_a)\equiv1$，故全对称表示又称为恒等表示．

还可解出二重根 $\nu=0$，它给出一个二维表示．把二重根 $\nu=0$ 代入(3-81)，只得到一个独立方程

$$a_1+a_2+a_3=0, \tag{3-83}$$

解不能唯一确定，满足上式的任意两个独立解都构成 S_3 群 $\nu=0$ 表示的两个基，例如可以选为

$$\begin{cases}\psi_1^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{6}}(2\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3),\\ \psi_{-1}^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{2}}(\varphi_2-\varphi_3).\end{cases}\quad \begin{cases}\psi_1'^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{6}}(\varphi_1+\varphi_2-2\varphi_3),\\ \psi_{-1}'^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_2).\end{cases}\quad \begin{cases}\psi_1''^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{6}}(\varphi_1-2\varphi_2+\varphi_3),\\ \psi_{-1}''^{(0)}=\sqrt{\dfrac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_3).\end{cases} \tag{3-84}$$

等等(可以有无穷多种选法)．容易证明，$\{\psi\}$ 荷载 S_3 群的一个二维不可约表示．因为如果它为可约，则必可分解为两个一维 IR，其基矢必为 S_3 群所有群元算符的共同本征函数．直接计算立刻可知，在以 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_{-1}^{(0)}$ 为基的空间中，(12)和(23)置换算符的共同本征矢量只能是零矢量，于是 $\{\psi\}$ 荷载的表示为 S_3 群的不可约表示．此外 $\{\psi\}$，$\{\psi'\}$ 和 $\{\psi''\}$ 之间只差一个线性变换，因此它们给出的表示互相等价．换言之，CSCO-I 只能决定到不等价的不可约表示为止，它无法区分互相等价的不可约表示．为了区分互相等价的不可约表示，即为了把不可约基唯一定下来，必须对 ψ 附加其它限制．由于(3-84)式是 S_3 群 CSCO-I 的本征函数，所以也必定是 S_3 群三循环类算符 $C_{(3)}$ 的本征函数，因此 $C_{(3)}$ 不提供新算符．我们只好从 S_3 的子群身上打主意．通常不但要求 ψ 是 S_3 群的 IR 基，而且还要求 ψ 也是 S_3 群的子群 S_2 的 IR 基．这种基称为 $S_3\supset S_2$ 分类基．根据定理 5，可知现在不但要求 ψ 是 S_3 群的完备算符集 $C(3)$ 的本征函数，而且还要求 ψ 是 S_2 群的完备算符集 $C(2)$ 的本征函数，即

$$\begin{pmatrix}C(3)\\C(2)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}=\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}, \tag{3-85}$$

$C(2)=(12)$．利用表 3.4 由 $C(2)=(12)$ 的本征方程得到以下两个解：

$$m=1,\ \text{二重根},\ a_2=a_3, \tag{3-86}$$

$$m=-1,\ \text{单根},\ a_1=0,\ a_2=-a_3. \tag{3-87}$$

将方程(3-86)式和(3-83)式联立，得到的一个解就是(3-84)式中的 $\psi_1^{(0)}$．方程(3-87)式和(3-83)式联立时，(3-83)式是多余的，所以由(3-87)式一个方程就得到另一个解，就是(3-84)式中的 $\psi_{-1}^{(0)}$．这里用本征值 m 标志不可约基的分量．

由此可见，通过附加要求——要求 $\psi_m^{(\nu)}$ 为 S_2 群的不可约基，就把 S_3 群的不可约表示完全定下来了，而不是只定到不等价表示为止．

因为 $(12)\psi^{(3)}=1\cdot\psi^{(3)}$，因此全对称解 $\psi^{(3)}$ 也是 S_2 群的不可约基，故 $\psi^{(3)}$ 也可写为 $\psi_1^{(3)}$．

小结：S_3 群的 CSCO-I $C(3)$ 是三维类空间的 CSCO．到了 $\alpha^2\beta$ 组态空间 $\{\varphi_i\}$，尽管它也是一个三维空间，$C(3)$ 不再完备，即 $C(3)$ 的本征值有简并，这反映了由 CSCO-I 只能定

到不等价的不可约表示为止．为了消除简并，除 $C(3)$ 外可再加上一个算符 $C(2)$，$C(2)$ 为 S_3 群的子群 S_2 的 CSCO-I．两个算符 $(C(3),\ C(2))$ 构成组态空间 $\{\varphi_i\}$ 的 CSCO，它的本征值不再简并，共有三套本征值，$\lambda=(\nu,\ m)=(3,\ 1),\ (0,\ 1),\ (0,\ -1)$，对应于三个本征函数 $\psi_1^{(3)}$，$\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_{-1}^{(0)}$．本征函数 $\psi_m^{(\nu)}$ 是 $S_3\supset S_2$ 分类基，它分别属于 S_3 群和 S_2 群的不可约表示 ν 和 m．$(C(3),\ C(2))$ 称为 S_3 群的第二类完备算符集（CSCO-II），CSCO-II 的普遍定义见 § 3.8．

前面解联立本征方程(3-85)时，我们是先解 $C(3)$，再解 $C(2)$．实际计算时，其实先解 $C(2)$，后解 $C(3)$ 更为方便，现在我们用同一例子说明．

由 $C(2)$ 的本征方程立刻得到 $m=-1$ 的单根解(3-87)式，容易验证，它也是 $C(3)$ 的本征解，本征值为零，于是得到一个解 $\psi_{-1}^{(0)}$．

由(3-86)式得到 $m=1$ 的解：$a_2=a_3$．选 $a_1,\ a_2$ 为独立变数，在方程组(3-81)中取出关于独立变数 $a_1,\ a_2$ 的两个方程，并利用 $a_3=a_2$ 消去 a_3，得到以下两个方程

$$\begin{cases}a_1+2a_2=\nu a_1,\\ a_1+2a_2=\nu a_2,\end{cases}\qquad \begin{vmatrix}1-\nu & 2\\ 1 & 2-\nu\end{vmatrix}=\nu(\nu-3)=0. \tag{3-88}$$

由此立刻解得

$$\begin{aligned}(\nu,\ m)&=(3,\ 1), & a_1&=a_2=a_3,\\ (\nu,\ m)&=(0,\ 1), & a_1&=-2a_2=-2a_3,\end{aligned} \tag{3-89}$$

和前面一致．后一种做法的好处是这里利用 $C(2)$ 的方程缩小未知数个数，使得原来要解 $C(3)$ 的三阶方程，化到只需解二阶方程．这在高维表示约化时尤其重要，利用 $C(2)$ 的本征方程，几乎可使未知数的个数缩小一半．

对于 $\nu=0$ 的二维表示，传统理论用下面两个杨盘标志

$$\begin{aligned}\psi_1^{(0)}&=\left|\ \begin{matrix}\boxed{1}\boxed{2}\\ \boxed{3}\end{matrix}\ \right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}(2\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3),\\ \psi_{-1}^{(0)}&=\left|\qquad\qquad\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_2-\varphi_3).\end{aligned} \tag{3-90}$$

知道了不可约基 $\psi^{(\nu)}$ 就可根据 $D_{ij}^{(\nu)}(R)=\langle\psi_i^{(\nu)}|R|\psi_j^{(\nu)}\rangle$ 及表 3.4，求出置换算符的 $\nu=0$ 不可约表示矩阵元，例如

$$D^{(0)}(e)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad D^{(0)}(12)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad D^{(0)}(23)=\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & 1/2\end{pmatrix}. \tag{3-91a}$$

这里第一行(列)对应于 $m=1$．第二行(列)对应于 $m=-1$．利用(1-8b)式和(1-9)式，就可得出所有其余置换算符的矩阵表示，例如 $D^{(0)}(13)=D^{(0)}(23)D^{(0)}(12)D^{(0)}(23)$，$D^{(0)}(123)=D^{(0)}(13)D^{(0)}(12)$ 等等，得到结果如下

$$\begin{aligned}&D^{(0)}(13)=\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2\end{pmatrix},\quad D^{(0)}(123)=\begin{pmatrix}-1/2 & \sqrt{3}/2\\ -\sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix},\\ &D^{(0)}(132)=\tilde{D}^{(0)}(123)=\begin{pmatrix}-1/2 & -\sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{3-91b}$$

注意不可约基(3-90)式对交换粒子坐标编号 2, 3 或交换坐标编号 1, 3 没有对称性．从量子力学角度看，由于

$$[(12),\ (23)]\neq 0,\quad [(12),\ (13)]\neq 0. \tag{3-92}$$

因此三个算符 (12), (23), (13) 不能同时具有确定值. 在算符(12)为对角化的表象(3-90)式中,算符(23)和(13)一般说没有确定值(对某些特殊的态,如全对称态,可以例外).

前面说过, S_3 群有三个互相同构的子群 $S_2 \equiv S_2(12)$, $S_2(23)$, 和 $S_2(13)$. 因此我们也可以求 $S_3 \supset S_2(23)$ 分类基,或 $S_3 \supset S_2(13)$ 分类基. 不难看出,(3-84)式中的 $\psi'^{(0)}$ 和 $\psi''^{(0)}$ 分别为 $S_3 \supset S_2(23)$ 和 $S_3 \supset S_2(13)$ 分类基,

$$(23)\psi'^{(0)}_{\pm 1} = \pm \psi'^{(0)}_{\pm 1}, \quad (13)\psi''^{(0)}_{\pm 1} = \pm \psi''^{(0)}_{\pm 1}. \tag{3-93}$$

即 $\psi'^{(0)}_1$($\psi'^{(0)}_{-1}$) 态中, 坐标 2, 3 为对称(反对称), $\psi''^{(0)}_1$($\psi''^{(0)}_{-1}$) 态中, 坐标 1, 3 为对称(反对称).

由此可见, 用杨盘 $\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}$ 标志的态 $\psi_1^{(0)}$ 中, 虽然 1, 3 处于同一列, 但对交换 1, 3 并不反对称; 用杨盘 $\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}$ 标志的态 $\psi_{-1}^{(0)}$ 中, 虽然 1, 3 处于同一行, 但对交换 1, 3 并不对称. 只有相邻数字(如 1, 2)处于同一行才为对称; 相邻数字处于同一列为反对称.

习　　题

1. 证明在 $\psi_1^{(0)} = \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array} \right\rangle$ 中, 1, 3 处于对称的几率和 2, 3 处于对称的几率都为 1/4, 处于反对称的几率都为 3/4. 在 $\psi_{-1}^{(0)} = \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \right\rangle$ 态中, 1, 3 处于对称的几率和 2, 3 处于对称的几率都为 3/4, 而处于反对称的几率为 1/4.

2. 用本征函数法将 S_3 的三维可约表示 $\varphi_1 = |\alpha\beta\beta\rangle$, $\varphi_2 = |\beta\alpha\beta\rangle$, $\varphi_3 = |\beta\beta\alpha\rangle$ 进行约化.

(2) 投影算符法

将(3-44a)式得到的投影算符 $Q^{(\nu)}$(它和 $P^{(\nu)}$ 差一无关紧要的常数因子)作用在表 3.4 的 φ_1、φ_2 或 φ_3 上,如果作用的结果不为零,则可得到 $\psi^{(\nu)}$. 例如

$$\psi^{(3)} = aQ^{(3)}\varphi_1 = \sqrt{\frac{1}{3}}(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3). \tag{3-94}$$

这里 a 为常数. 将 $Q^{(3)}$ 作用在 φ_2 或 φ_3 上,仍得到上面结果,该结果和(3-82)式一致. 由此可见, 由 $Q^{(3)}$ 投影出 S_3 群 $\nu = 3$ 的一个一维不可约表示. 将投影算符 $Q^{(0)}$ 作用在 φ_i 上, 得到:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(0)} &= bQ^{(0)}\varphi_1 = \sqrt{\frac{1}{6}}(2\varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3) \\ \psi_2^{(0)} &= bQ^{(0)}\varphi_2 = \sqrt{\frac{1}{6}}(2\varphi_2 - \varphi_1 - \varphi_3) \\ \psi_3^{(0)} &= bQ^{(0)}\varphi_3 = \sqrt{\frac{1}{6}}(2\varphi_3 - \varphi_1 - \varphi_2) \end{aligned} \tag{3-95}$$

因为 $\nu = 3$ 为一维本征空间, 故 $Q^{(0)}$ 投影出一个二维表示空间, 因此以上三个函数中只有两个是线性独立的. 我们可任选两个, 例如选 $\psi_1^{(0)}$ 和 $\psi_2^{(0)}$ 作为 $\nu = 0$ 不可约基, 但 $\langle\psi_1^{(0)}|\psi_2^{(0)}\rangle \neq 0$, 利用 Schmidt 正交手续[23]可得到和 $\psi_1^{(0)}$ 正交的一个解

$$\psi_{-1}^{(0)} = \sqrt{\frac{1}{3}}(\psi_1^{(0)} + 2\psi_2^{(0)}) = \sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_2 - \varphi_3),$$

和(3-84)式一致．可以看到，这里跟方法(1)一样，单凭投影算符 $Q^{(\nu)}$ 只能定到不等价的不可约表示为止．

方法(1)的优点是，知道 CSCO 以后，可直接解本征方程(3-75)式，而不必先在类空间求出 $Q^{(\nu)}$．这种方法易于程序化，我们以后主要采用这种方法．投影算符法虽然表面上看上去简单，但有不少缺点，见 § 3.13．

3．S_3 群 $\alpha\beta\gamma$ 组态

三个粒子处于 $\alpha\beta\gamma$ 组态(例如 α, β, γ 为 $l=1$, $m=1$, 0, -1 三个态)，共有六个可能的状态 φ_1, $\cdots$, φ_6 (见(2-70)式)，它们构成 S_3 群的正则表示空间，它和群空间是一对一的映射．我们现在要把 φ_i 线性组合成 $S_3\supset S_2$ 分类基，$\psi_m^{(\nu)}=\sum\limits_i u_i\varphi_i$，它仍满足本征方程(3-85)式．求解 $\psi_m^{(\nu)}$ 等价于把 $C(3)$ 和 $C(2)$ 的正则表示矩阵 $D(C(3))=D(12)+D(23)+D(13)$ 和 $D(C(2))=D(12)$ 同时对角化．利用正则表示矩阵(2-71)式得到 $C(3)$ 和 $C(2)$ 的本征方程

$$\begin{pmatrix} -\nu & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -\nu & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -\nu & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -\nu & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & -\nu & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & -\nu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix}=0, \quad \left(\begin{array}{cc|cc|cc} -m & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -m & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & -m & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -m & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & -m & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -m \end{array}\right)\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix}=0. \tag{3-96a、b}$$

本征值(ν)可用目察法得到，从(3-96a)式的系数矩阵看到 $\nu=0$ 为四重根[1]．因为 $C(3)$ 在类空间只有三个本征值 $\nu=3$, 0, -3，而从类空间扩大到群空间，$C(3)$ 的本征值谱不会改变，所以(3-96a)式还应有两个本征值 $\nu=\pm3$，且都为单根．对单根，由(3-96a)式立即可求得两个解 $\psi^{(3)}$ 和 $\psi^{(-3)}$

$$\begin{aligned} \psi^{(3)}&=\psi_1^{(3)}=\left|\,\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}\,\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}(\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5+\varphi_6), \\ \psi^{(-3)}&=\psi_{-1}^{(-3)}=\left|\,\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\,\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}(\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3-\varphi_4+\varphi_5+\varphi_6). \end{aligned} \tag{3-97}$$

不难验证，它们也是 $C(2)$ 的本征函数，本征值分别为 ±1．因为 $(ij)\psi^{(-3)}=-\psi^{(-3)}$，所以 $\psi^{(-3)}$ 是一个全反对称态，用杨图 $\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}$ 标志．它构成 S_3 群的一维交替表示，即所有奇置换对应于 -1，所有偶置换对应于 $+1$．

$$D(12)=D(23)=D(13)=-1, \quad D(e)=D(123)=D(132)=1. \tag{3-98}$$

将四重根 $\nu=0$ 代入 $C(3)$ 的本征方程只得到两个独立方程

$$\nu=0:\ u_1+u_5+u_6=0, \quad u_2+u_3+u_4=0. \tag{3-99}$$

再由 $C(2)$ 的本征方程(3-96b)，可得到三个方程

$$m=\pm1:\ u_1=\pm u_2,\ u_3=\pm u_6,\ u_4=\pm u_5. \tag{3-100}$$

1) 因为 $\nu=0$ 时，(3-96a)式的系数矩阵中只有两个行向量是独立的，所以 $\nu=0$ 必为四重根．

结合(3-99)式和(3-100)式，对$(\nu, m)=(0, 1)$和$(0, -1)$两种情形，都只得到一个独立方程

$$(\nu, m)=(0, 1):\ u_1+u_3+u_4=0. \tag{3-101}$$

$$(\nu, m)=(0, -1):\ u_1-u_3-u_4=0. \tag{3-102}$$

因此解不能唯一确定. 原因何在呢? 由(3-91)式我们知道$\nu=0$为二维不可约表示，而现在$\nu=0$为四重根，即有4个线性独立解都属于$\nu=0$，这表明$\nu=0$二维不可约表示出现两次，也就是说S_3群的6维群空间按CSCO-I的本征空间分解时，

$$L_g=L_{(3)}+L_{(0)}+L_{(-3)}, \tag{3-103}$$

这时四维本征空间$L_{(0)}$不是不可约的，而是可以约化成两个二维不可约表示

$$L_{(0)}=L_{(0)1}\oplus L_{(0)2}. \tag{3-104}$$

为了区分这种一个不可约表示(ν)出现不止一次的情形，必须寻找新的量子数. 根据§2.9定理1和§2.10的讨论，只要能找到和所有群元都对易的算符$\bar{C}_1$，就可将CSCO-I C的本征空间$L_{(\nu)}$再按新算符$\bar{C}_1$的本征空间进行分解

$$L_{(\nu)}=\sum_{k_1}\oplus L_{(\nu)k_1}, \quad \bar{C}_1L_{(\nu)k_1}=k_1L_{(\nu)k_1}. \tag{3-105}$$

如果空间$L_{(\nu)k_1}$还进一步可约，我们再找一个算符$\bar{C}_2$，它和群G及算符$\bar{C}_1$均对易. 于是空间$L_{(\nu)k_1}$又可进一步按$\bar{C}_2$的本征空间进行分解，等等. 直至找到这样一个算符集$\bar{C}(s)=(\bar{C}_1, \bar{C}_2, \cdots)$，它和群$G$的CSCO C的共同本征空间$L_{(\nu)k}$, $k=(k_1, k_2, \cdots)$为群G的不可约空间. 于是量子数k可用来区分不可约表示(ν)出现若干次的情形.

显然在群G中再也找不到这种算符了. 因为和所有群元都对易的算符只有群的类算符，而C已经是类空间的CSCO，它的本征空间$L_{(\nu)}$必定也是所有其余类算符的本征空间(如对S_3群，$L_{(0)}$也是3循环类算符$C_{(3)}$的本征空间，$\lambda_{(3)}=-1$). 换言之，我们不可能利用群G的其余类算符将CSCO-I的本征空间进一步分解.

既然群G中找不到这种算符，只好另想办法. 如果我们能找到另一个群$\bar{G}$，它和群G对易，那就有可能利用群$\bar{G}$所提供的算符将群G的CSCO-I的本征空间进一步分解成群G的不可约空间. 下面我们先从置换群着手解决这一问题.

§3.5 态置换群(态指标全不相同情形)

假定有n个粒子1, 2, $\cdots$, n，处于n个全不相同的单粒子态$i_1, i_2, \cdots, i_n$上. 我们称n粒子乘积态

$$\Phi_0(X)=\Phi_0(x_1, \cdots, x_n)=\varphi_{i_1}(x_1)\varphi_{i_2}(x_2), \cdots, \varphi_{i_n}(x_n)$$

$$=|\omega_0\rangle=\prod_{a=1}^{n}\varphi_{i_a}(x_a)=|i_1i_2, \cdots, i_n\rangle \tag{3-106}$$

为正序态，并用记号$|\omega_0\rangle$代表. 所谓正序态指第1个粒子一定处在第1号态i_1，第2个粒子一定处于第2号态i_2等等. 态的编码是预先指定的，如$l=1$的态，可指定$m=1, 0, -1$分别为1, 2, 3号态，但一经指定，就不再改变，i_1, i_2, i_3永远分别对应于$m=1, 0, -1$三个态. 按这样的指定，显然$|10-1\rangle$为一正序态，而其余的态，如$|01-1\rangle$, $|-101\rangle\cdots$等等全为非正序态.

前面我们定义置换群S_n的元素p为置换坐标$\{x_a\}$的下标，现在可定义另一种置换，用

花体 $\mathscr{P}$ 表示，它置换态 $\{i_a\}$ 的下标，称为态置换. 所有的态置换 $\mathscr{P}$ 构成一个群，称为态置换群，记作 $\mathscr{S}_n$. 例如

$$\mathscr{P}_{123}|i_1i_2i_3\rangle=|i_2i_3i_1\rangle,\quad \mathscr{P}_{23}|i_2i_3i_1\rangle=|i_3i_2i_1\rangle. \tag{3-107a}$$

注意上式和坐标置换

$$p_{123}|i_1i_2i_3\rangle=|i_3i_1i_2\rangle,\quad p_{23}|i_2i_3i_1\rangle=|i_2i_1i_3\rangle \tag{3-108}$$

的区别.

为了简化记号，以后常用 $\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \delta\cdots$ 分别代表 $i_1,\ i_2,\ i_3,\ i_4,\ \cdots$. 于是 $\mathscr{P}_{12}=(\alpha\beta)$，就代表 α 和 β 的置换，$\mathscr{P}_{123}=(\alpha\beta\gamma)$，代表进行指标代换 $\alpha\to\beta\to\gamma\to\alpha$. (3-107a)式可写成

$$\mathscr{P}_{123}|\alpha\beta\gamma\rangle=|\beta\gamma\alpha\rangle,\quad \mathscr{P}_{23}|\beta\gamma\alpha\rangle=|\gamma\beta\alpha\rangle. \tag{3-107b}$$

态置换群 $\mathscr{S}_n$ 有三个重要性质:

(1) $\mathscr{S}_n$ 群和坐标置换群 S_n 同构.

(2) $\mathscr{S}_n$ 群和 S_n 群对易，即态置换和坐标置换对易

$$[p_a,\ \mathscr{P}_b]=0. \tag{3-109}$$

(3) 作用在正序态 $|\omega_0\rangle$ 上，$p=\mathscr{P}^{-1}$，即

$$p|\omega_0\rangle=\mathscr{P}^{-1}|\omega_0\rangle \tag{3-110}$$

性质(1)，(2)不证自明，第(3)点证明如下:

令 $p=\begin{pmatrix} a \\ a' \end{pmatrix}$，即把坐标编码 $x_a\to x_{a'}$，而 $\mathscr{P}=\begin{pmatrix} i_a \\ i_{a'} \end{pmatrix}$，则

$$p\mathscr{P}|\omega_0\rangle=p\,\mathscr{P}\prod_{a=1}^{n}\varphi_{i_a}(x_a)=\prod_{a'=1}^{n}\varphi_{i_{a'}}(x_{a'})=|\omega_0\rangle. \tag{3-111}$$

于是(3-110)式成立.

注意，由(3-110)式不能作出结论说 $p=\mathscr{P}^{-1}$，因为(3-110)式对非正序态一般说不成立(不排斥对个别非正序态也可能成立)，例如(3-107a)式和(3-108)式表明，作用在非正序态 $|i_2i_3i_1\rangle$ 上，$p_{23}\neq\mathscr{P}_{23}^{-1}=\mathscr{P}_{23}$.

有些书上(如 Hamermesh 10-2 节)用的所谓态置换 $\boldsymbol{p}$ 就定义为坐标置换 p 之逆，即对单粒子态不规定固定的编号，而是根据该态属于第几个粒子的就认为它是第几号态. 例如对乘积态 $|10-1\rangle$，认为 $i_1=1,\ i_2=0,\ i_3=-1$，对另一个乘积态 $|-101\rangle$ 则认为 $i_1=-1,\ i_2=0,\ i_3=1$. 也就是说，在这种约定下，任一个 n-粒子乘积态，不管是不是正序态，都永远写成 $\prod_{a=1}^{n}\varphi_{i_a}(x_a)$ 的形式，这样定义的态置换 $\boldsymbol{p}$ 当然永远为坐标置换之逆

$$\boldsymbol{p}=p^{-1}. \tag{3-112}$$

因此 $\{\boldsymbol{p}\}$ 本质上仍然是坐标置换群，而没有给出新的一个群. 这种态置换群在我们这里没有什么用处，所以我们指的态置换群永远按(3-107)式定义.

S_n 群或 $\mathscr{S}_n$ 群的 $n!$ 个元素作用在正序态 $\Phi_0=|\omega_0\rangle$ 上，得到 $n!$ 个态

$$\varphi_a=p_a|\omega_0\rangle=\mathscr{P}_a^{-1}|\omega_0\rangle=p_a|i_1,\ i_2,\ \cdots,\ i_n\rangle, \tag{3-113}$$

它们既构成 S_n 群的正则表示基底，也构成 $\mathscr{S}_n$ 群的正则表示基底. 现在我们来证明 $\mathscr{S}_n$ 群的类算符 $\mathscr{C}_f$ 和 S_n 群的类算符 C_f 相等. 因为

$$\mathscr{C}_f\varphi_a=\mathscr{C}_f\mathscr{P}_a^{-1}|\omega_0\rangle=\mathscr{P}_a^{-1}\mathscr{C}_f|\omega_0\rangle=\mathscr{P}_a^{-1}C_f|\omega_0\rangle=\mathscr{P}_a^{-1}C_f|\omega_0\rangle=C_f\mathscr{P}_a^{-1}|\omega_0\rangle=C_f\varphi_a, \tag{3-114}$$

这里第三个等号利用了(3–110)式和(3–38)式，第四个等号利用了 S_n 群的类为 ambivalent 类，第五个等号利用了(3–109)式．由于(3–114)式对任一 φ_s 均成立，所以

$$\mathscr{C}_j = C_j \quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ N. \tag{3–115a}$$

由此可见，S_n 群和 $\mathscr{S}_n$ 群的 CSCO–I 相等

$$C(n) = \mathscr{C}(n). \tag{3–115b}$$

因此若 $\psi^{(\nu)}$ 属于 S_n 群的不可约表示(ν)，则它也必属于 $\mathscr{S}_n$ 群的不可约表示(ν)．

因为有(3–115)式，所以 $\mathscr{S}_n$ 群的类算符 $\mathscr{C}_j$ 不能给我们提供新算符，但 $\mathscr{S}_n$ 群的子群链 $\mathscr{S}_{n-1}\supset\mathscr{S}_{n-2}\supset\cdots\supset\mathscr{S}_2$ 中的各个子群的 CSCO $\mathscr{C}(i)$，$i=n-1,\ \cdots,\ 2$，满足互相对易以及和 S_n 群对易的要求，且 $\mathscr{C}(i)\neq C(i)$ [1]，于是 S_n 群 CSCO–I 的本征空间 $L_{(\nu)}$ 可进一步按 $\mathscr{C}(i)$ 的本征空间进行分解．在讨论一般情形之前，让我们先回到§3.4 中未解决完的 S_3 群正则表示的约化问题．

§3.6 S_3 群正则表示的分解

1．态置换群 $\mathscr{S}_3$ 的子群 $\mathscr{S}_2$ 的 CSCO $\mathscr{C}(2)=\mathscr{P}_{12}$ 给我们提供了一个新算符，它和 $C(3)$，$C(2)$ 均对易，因此可求它们的共同本征函数

$$\begin{pmatrix} C(3) \\ C(2) \\ \mathscr{C}(2) \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)k} = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)k},\quad \psi_m^{(\nu)k} = \sum_{i=1}^{6} u_i \varphi_i, \tag{3–116}$$

这里 φ_i 见(2–70)式．由态置换定义：$\mathscr{P}_{12}=(\alpha\beta)$，得

$$\mathscr{P}_{12}|\alpha\beta\gamma\rangle = |\beta\alpha\gamma\rangle,\ \mathscr{P}_{12}|\gamma\beta\alpha\rangle = |\gamma\alpha\beta\rangle,\ \mathscr{P}_{12}|\alpha\gamma\beta\rangle = |\beta\gamma\alpha\rangle,$$

即

$$\mathscr{P}_{12}\varphi_1 = \varphi_2,\ \mathscr{P}_{12}\varphi_3 = \varphi_5,\ \mathscr{P}_{12}\varphi_4 = \varphi_6. \tag{3–117}$$

由 $(\mathscr{P}_{12})^2=1$，知本征值 $k=\pm1$．将 k 的本征值代入本征方程(3–116)式，并注意到(3–117)式，可得到以下方程

$$k=\pm1;\ u_1=\pm u_2,\ u_3=\pm u_5,\ u_4=\pm u_6. \tag{3–118}$$

将(3–100)，(3–101)，(3–102)和(3–118)式联立，可得到以下 4 个解：

$$(\nu,\ m,\ k)=(0,\ 1,\ 1),\quad \psi_1^{(0)1}(\alpha\beta\gamma) = \left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \beta \\ \hline \gamma \\ \cline{1-1}\end{array}\ \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{12}}[2(\varphi_1+\varphi_2)-(\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5+\varphi_6)].$$

$$(0,\ -1,\ 1),\quad \psi_{-1}^{(0)1}(\alpha\beta\gamma) = \left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \beta \\ \hline \gamma \\ \cline{1-1}\end{array}\ \right\rangle = \frac{1}{2}[-\varphi_3+\varphi_4-\varphi_5+\varphi_6]$$

$$(0,\ 1,\ -1),\quad \psi_1^{(0)-1}(\alpha\beta\gamma) = \left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \gamma \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}\ \right\rangle = \frac{1}{2}[-\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5-\varphi_6] \tag{3–119a}$$

$$(0,\ -1,\ -1),\quad \psi_{-1}^{(0)-1}(\alpha\beta\gamma) = \left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \gamma \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}\ \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{12}}[2(\varphi_1-\varphi_2)+\varphi_3+\varphi_4-\varphi_5-\varphi_6].$$

---

1) $\mathscr{S}_n$ 群的子群 $\mathscr{S}_l$ 的 l 类类算符 $\mathscr{C}_l(i)$ 和 S_n 群的子群 S_l 的 l 类类算符 $C_l(i)$ 显然不等，前者和 S_n 群对易，而后者和 S_n 群不对易．

由(3-115)可知 $O(3)=\mathscr{C}(3)$，根据定理 5 可知 (3-116) 的本征解 $\psi_m^{(\nu)k}$ 既是 $S_3\supset S_2$ 分类基，又是 $\mathscr{S}_3\supset\mathscr{S}_2$ 分类基．$\psi_m^{(\nu)k}$ 分别属于 S_3 群和 S_2 群的不可约表示 ν 和 m；分别属于 $\mathscr{S}_3$ 群和 $\mathscr{S}_2$ 群的不可约表示 ν 和 k．前面用填入数字的盘——杨盘来标志 $S_3\supset S_2$ 分类基，类似地可用填入态指标的盘——称为 Weyl 盘(进一步定义见 § 4.8)如 $\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \beta \\ \hline \gamma \\ \cline{1-1}\end{array}$ 或 $\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \gamma \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}$ 来标志 $\mathscr{S}_3\supset\mathscr{S}_2$ 分类基．和对于杨盘的约定完全一样，前者对交换 α,β 为对称，后者为反对称，而对交换 α,γ 或交换 β,γ 两者都没有确定对称性．因此我们除了用量子数 ν, m, k 来标志一个 $S_3\supset S_2$ 和 $\mathscr{S}_3\supset\mathscr{S}_2$ 分类基外，也可用两个盘——一个杨盘 Y_m^ν 和一个 Weyl 盘 W_k^ν 标志一个 $S_3\supset S_2$ 和 $\mathscr{S}_3\supset\mathscr{S}_2$ 分类基．全对称(全反对称)解(3-97)对交换态指标 α,β,γ 也为全对称(全反对称)．因此(3-97)式也可用两个盘来标志，即

$(\nu, m, k)=(3, 1, 1)$,

$$\psi_1^{(3)1}(\alpha\beta\gamma)=\left|\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline\end{array}\ \ \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma\\ \hline\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}[\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5+\varphi_6]$$

$$(-3,\ -1,\ -1),\ \psi_{-1}^{(-3)-1}(\alpha\beta\gamma)=\left|\ \begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline 3\\ \hline\end{array}\ \ \begin{array}{|c|}\hline \alpha\\ \hline \beta\\ \hline \gamma\\ \hline\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}[\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3-\varphi_4+\varphi_5+\varphi_6],\tag{3-119b}$$

(3-119a)式中的($\psi_1^{(0)1}$, $\psi_{-1}^{(0)1}$)和($\psi_1^{(0)-1}$, $\psi_{-1}^{(0)-1}$)分别构成 S_3 群的两个 $\nu=0$ 的二维不可约表示空间 $L_{(0)1}$ 和 $L_{(0)-1}$，不难验证，它们给出的不可约矩阵元和(3-91)式完全一样．这两个等价的(更确切地说是全等的)不可约表示是靠 $\mathscr{C}(2)$ 的量子数 k 来区分的，即 $C(3)$ 的四维本征空间 $L_{(0)}$ 分解为 $\mathscr{C}(2)$的两个本征空间之和

$$L_{(0)}=L_{(0)1}\oplus L_{(0)-1},\quad \mathscr{C}(2)\,L_{(0)k}=kL_{(0)k}.\tag{3-120}$$

($C(3)$, $C(2)$, $\mathscr{C}(2)$)三个算符构成 S_3 群正则表示空间的 CSCO，我们称它为 S_3 群的 CSCO-III．它们的共同本征空间全为一维．因此六维正则表示空间完全分解为一维子空间的直和

$$L_g=\sum_{\nu mk}\oplus L_{(\nu)mk}.\tag{3-121}$$

类似地($\psi_1^{(0)1}$, $\psi_1^{(0)-1}$)和($\psi_{-1}^{(0)1}$, $\psi_{-1}^{(0)-1}$)分别构成 $\mathscr{S}_3$ 群的两个 $\nu=0$ 的二维不可约表示基底．它们给出的态置换 $\mathscr{P}$ 的不可约矩阵元仍为(3-91)式．这两个 $\nu=0$ 不可约表示是靠 $C(2)$的量子数 m 来区分的．

2．前面通过先解 $C(3)$，后解 $C(2)$和 $\mathscr{C}(2)$的本征方程而得到本征解(3-119)．更方便的做法是先利用 $C(2)$和 $\mathscr{C}(2)$的方程，消去不独立的未知数 u，使得 $C(3)$的本征方程降阶．现将具体步骤说明如下：

(1) 先作出 $C(2)=(12)$和 $\mathscr{C}(2)=\mathscr{P}_{12}$ 对 $\{\varphi_i\}$ 的作用，列出下表：

表 3.6-1

$R\varphi_i$ \ R \ φ_i	φ_1 $\lvert\alpha\beta\gamma\rangle$	φ_2 $\lvert\beta\alpha\gamma\rangle$	φ_3 $\lvert\gamma\beta\alpha\rangle$	φ_4 $\lvert\alpha\gamma\beta\rangle$	φ_5 $\lvert\gamma\alpha\beta\rangle$	φ_6 $\lvert\beta\gamma\alpha\rangle$
(12)	φ_2	φ_1	φ_6	φ_5	φ_4	φ_3
$\mathscr{P}_{12}$	φ_2	φ_1	φ_5	φ_6	φ_3	φ_4

由此立刻解得

$$m=\pm 1: u_1=\pm u_2,\ u_3=\pm u_6,\ u_4=\pm u_5.$$
$$k=\pm 1: u_1=\pm u_2,\ u_3=\pm u_5,\ u_4=\pm u_6. \tag{3-122}$$

联立这两组方程，得

$$(m,\ k)=(1,\ 1):\ u_1=u_2,\ u_3=u_4=u_5=u_6,\ \text{选独立变数为}(u_1,\ u_3) \tag{3-123a}$$

$$(-1,\ -1):\ u_1=-u_2,\ u_3=u_4=-u_5=-u_6,\ \text{选独立变数为}(u_1,\ u_3) \tag{3-123b}$$

$$(1,\ -1):\ u_1=u_2=0,\ u_3=-u_4=-u_5=u_6. \tag{3-123c}$$

$$(-1,\ 1):\ u_1=u_2=0,\ u_3=-u_4=u_5=-u_6. \tag{3-123d}$$

(2) $(m,\ k)=(1,\ 1)$和$(-1,\ -1)$的情形，都剩下两个未知数u_1和u_3，我们只需从$C(3)$的本征方程中找到关于u_1和u_3的两个方程就够了，其余方程都是不独立的．根据(3-75b)式(那里的a_i就是这里的u_i)可知，只要知道$C(3)$对φ_1和φ_3的作用就行了，作用结果列在表 3.6-2．

表 3.6-2

φ_i \ $p\varphi_i$ \ p	(12)	(13)	(23)
φ_1	φ_2	φ_3	φ_4
φ_3	φ_6	φ_1	φ_5

令(3-75b)式中$C=C(3)$并利用上表立即得到u_1和u_3的方程

$$u_2+u_3+u_4=\nu u_1,\quad u_1+u_5+u_6=\nu u_3. \tag{3-124}$$

将(3-123a)式和(3-124)式联立得

$$\begin{aligned}u_1+2u_3&=\nu u_1,\\ u_1+2u_3&=\nu u_3,\end{aligned}\qquad \begin{vmatrix}1-\nu & 2\\ 1 & 2-\nu\end{vmatrix}=\nu(\nu-3)=0. \tag{3-125}$$

由(3-125)式及(3-123a)式可解出$\psi_1^{(3)1}$和$\psi_1^{(0)1}$，即为(3-119)式．

将(3-124)式和(3-123b)式联立得

$$\begin{aligned}-u_1+2u_3&=\nu u_1,\\ u_1-2u_3&=\nu u_3,\end{aligned}\qquad \begin{vmatrix}-1-\nu & 2\\ 1 & -2-\nu\end{vmatrix}=\nu(\nu+3)=0. \tag{3-126}$$

由(3-126)式和(3-123b)式可解出$\psi_{-1}^{(-3)-1}$和$\psi_{-1}^{(0)-1}$，和(3-119)式一致．

对$(m, k)=(1, -1)$和$(-1, 1)$，则不需利用$C(3)$的本征方程，由(3-123c)式和(3-123d)式就可求出解．由于这里$\nu=0$二维表示出现两次，因此可以判断上面求出的这两个解都对应于本征值$\nu=0$，即这两个解为$\psi_1^{(0)-1}$和$\psi_{-1}^{(0)1}$，和(3-119a)式一致．

可以看到这种方法有两个优点：

(1) 把原来解 6 阶矩阵的本征方程降低到只要解两个 2 阶本征方程．

(2) 不需要知道正则表示矩阵(2-71)式，而只要一个小表（表 3.6-2）就可得到我们所要的$C(3)$本征方程中的独立方程[如(3-124)式]．其余不独立的方程一概不要．

这种方法的优越性对求高阶群的不可约基更为突出．

§3.7 内 禀 群

§3.4～§3.6，我们以乘积态作为 S_3 群的可约基，讨论了可约表示的约化问题，现在要把它上升到一般理论．为此要作两方面的推广．1．把置换群的由乘积态构成的表示空间推广到任意表示空间，如群空间，群上函数空间等．2．把置换群推广到任一有限群．

对 S_n 群乘积态表示空间，我们找到了和 S_n 群同构且对易的态置换群 $\mathscr{S}_n$，$\mathscr{S}_n$ 群的子群的 CSCO–I 可用来区分 S_n 群的同一不可约表示出现不止一次的情形．现在对任何群 G 都要找一个和 G 对易而又反同构(或同构，因为同构和反同构没有本质的区别，见§1.4)的群 $\overline{G}$，这就是下面要引进的内禀群．

1．内禀群的定义

在群空间 L_g 中，对应于群 G 中任一元素 R，我们定义一个算符 $\overline{R}$，它对 L_g 中任一个元素 S 的作用为：

$$\overline{R}S=SR,\quad \text{当 } S \text{ 为基矢} \tag{3-127}$$

即它把 L_g 中的一个基矢 S 变到另一个基矢 SR．

我们来证明根据(3–127)式定义的算符集 $\overline{R}$、$\overline{S}$、$\overline{T}$、… 构成一个和 G 对易又和 G 反同构的算符群 $\overline{G}$．

首先要注意(3–127)式是用来定义 $\overline{R}$ 的，切勿把它看成一个算符恒等式，因此(3–127)式右乘 L_g 中的另一个元素 T 并不成立，即

$$\overline{R}ST\neq SRT. \tag{3-128}$$

而应当把 ST 看作 L_g 中的一个新元素，然后再利用(3–127)式，即

$$\overline{R}ST=\overline{R}(ST)=STR. \tag{3-129}$$

另一方面

$$S\overline{R}T=STR. \tag{3-130}$$

所以

$$[\overline{R},S]T=0. \tag{3-131}$$

又因 T 为 L_g 中任一元素，所以得出

$$[\overline{R},S]=0,\quad \overline{R}S=S\overline{R},\quad \text{当 } S \text{ 为算符}. \tag{3-132}$$

注意(3–127)式和(3–132)式的区别．(3–127)式中的 S 为基矢，而(3–132)式中的 S 为算符．究竟 S 应当视为基矢或算符由 S 所处的位置决定，如 S 处在最右边，则 S 为基矢，否则为算符．例如 $\overline{R}ST$ 中，S 为算符，T 为基矢．因此 $\overline{R}ST=(\overline{R}S)T=S\overline{R}T=STR$．

此外根据(3–127)式又可得：

$$\overline{R}_2\overline{R}_1S=\overline{R}_2SR_1=SR_1R_2. \tag{3-133}$$

(3–127)式表明群 $\overline{G}$ 的一个元素 $\overline{R}$ 对应于群 G 的一个元素 R，(3–133)式则表明群 $\overline{G}$ 的两个元素之积 $\overline{R}_2\overline{R}_1$ 对应于群 G 的两个元素之积 R_1R_2．根据假设(R_1, R_2, …)构成群 G，所以($\overline{R}_1$, $\overline{R}_2$, …)也必定构成一个群 $\overline{G}$，它和群 G 反同构．我们称**群 $\overline{G}$ 为群 G 的内禀群**，在不至于引起混淆的地方就简称为内禀群 $\overline{G}$，至于为什么要取名为内禀群，见§5.14．

(3–132)式表明**内禀群 $\overline{G}$ 和群 G 对易**．

2. 内禀群 $\overline{G}$ 的正则表示

群空间 L_g 构成群 $\overline{G}$ 的正则表示空间，$\overline{G}$ 的正则表示 $D(\overline{G})$[1] 由(3-127)式给出：

$$\overline{R}_b R_c = \sum_{a=1}^{g} D_{ac}(\overline{R}_b) R_a = R_c R_b, \tag{3-134}$$

于是

$$D_{ac}(\overline{R}_b) = \begin{cases} 1 & \text{当 } R_c R_b = R_a \\ 0 & \text{其它情形.} \end{cases} \tag{3-135}$$

利用群的乘法表和(3-135)式可立刻写下内禀群的正则表示. 例如 S_3 群表 1.2 的第 5 列（对应于 $R_b=(123)$）中的数字 5, 4, 2, 3, 6, 1 就给出 $D(\overline{123})$ 中 1 至 6 列矩阵元不为零的行号，即 $D_{51}=D_{42}=D_{23}=D_{34}=D_{65}=D_{16}=1$. 利用 (2-71a) 式引进的记号，由表 1.2 按列阅读，可写下内禀群的正则表示：

$$\begin{aligned} &D(\overline{e})=\{123456\}, \quad D(\overline{12})=\{215634\}, \quad D(\overline{13})=\{361542\}, \\ &D(\overline{23})=\{456123\}, \quad D(\overline{123})=\{542361\}, \quad D(\overline{132})=\{634215\}. \end{aligned} \tag{3-136}$$

直接用矩阵相乘[2]可以验证 $D(\overline{G})$ 和 $D(G)$ 对易且反同构.

设 A 为群代数的某一元素

$$A=\sum_a u_a R_a. \tag{3-137a}$$

它的正则表示矩阵 $D_{ab}(A)=\langle a|A|b\rangle$ 由下式决定

$$AR_b=\sum_a \langle a|A|b\rangle R_a. \tag{3-137b}$$

令 $\overline{A}$ 为 A 所对应的内禀元素

$$\overline{A}=\sum_a u_a \overline{R}_a. \tag{3-137c}$$

它的正则表示矩阵 $D_{ab}(\overline{A})=\langle a|\overline{A}|b\rangle$ 由下式决定

$$\overline{A}R_b=R_b A=\sum_a \langle a|\overline{A}|b\rangle R_a. \tag{3-137d}$$

容易证明

$$\langle a|\overline{A}|b\rangle=\langle b^{-1}|A|a^{-1}\rangle. \tag{3-137e}$$

因此 $D(\overline{A})$ 和 $\tilde{D}(A)$ 为相似矩阵. 因而 $D(\overline{R})$ 和 $\tilde{D}(R)$ 为相似矩阵.

令(3-137b)式中的 $A\to A^{\dagger}$，再将整个式子取厄米共轭，并利用 $R_a^{\dagger}=R_a^{-1}$，就可证明(3-137e)式.

3. 内禀群元对群上函数的作用

类似于(2-85)式和(2-86)式，由 (3-127) 式可导出内禀群元 $\overline{R}$ 对群上函数 $u(S)$ 的作用. $\overline{R}$ 对 L_g 中任一矢量 $P=\sum_s u(S)S$ 的作用为

$$\overline{R}P=\overline{R}\sum_s u(S)S=PR=\sum_s u(S)\,SR=\sum_s u(SR^{-1})S.$$

---

1) Boerner 称表示 $D(\overline{G})$ (3-135) 式为群 G 的反表示(inverted representation)，因为矩阵群 $D(\overline{G})$ 和 G 反同构. 有的书上还定义一种所谓群 G 的右正则表示 $D(\underline{G})$ (而(2-76)式给出的表示 $D(G)$ 称为左正则表示)

$$\underline{R}_b R_c=\sum_{a=1}^{g} D_{ac}(\underline{R}_b) R_a=R_c R_b^{-1}.$$

$D(\underline{G})$ 和 G 同构，显然 $D(\underline{R})=D(\overline{R}^{-1})$. 过去只着眼于表示 $D(\overline{G})$ 或 $D(\underline{G})$，我们则着眼于算符群 $\overline{G}$. $D(\overline{G})$ 仅仅是内禀群的一个表示，内禀群还可以有各种各样的表示.

2) 把矩阵分成子矩阵后，可用以下方法作矩阵乘法：

$$\left(\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|c} B_{11} & B_{12} \\ \hline B_{21} & B_{22} \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|c} A_{11}B_{11}+A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12}+A_{12}B_{22} \\ \hline A_{21}B_{11}+A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12}+A_{22}B_{22} \end{array}\right).$$

所以

$$\bar{R}u(S)=u(SR^{-1}).\tag{3-138}$$

4. 内禀群的性质

由前面讨论可知，内禀群有以下性质：

(1) $\bar{G}$ 的任一群元算符和 G 的任一群元算符对易

$$[\bar{R},\ S]=0.\tag{3-139}$$

(2) $\bar{G}$ 和 G 反同构．因此有关群 G 的一切结论对内禀群 $\bar{G}$ 也适用．例如若 $C=k_1C_{i_1}+\cdots+k_lC_{i_l}$ 为群 G 的 CSCO-I，则 $\bar{C}=k_1\bar{C}_{i_1}+\cdots k_l\bar{C}_{i_l}$ 为群 $\bar{G}$ 的 CSCO-I，$\bar{C}_i$ 为内禀群 $\bar{G}$ 的类算符

$$\bar{C}_i=\sum_{l=1}^{g_i}\bar{R}_l^{(i)}.\tag{3-140}$$

若 G 有子群链 $G\supset G_1\supset G_2\supset\cdots$，则 $\bar{G}$ 有对应的子群链 $\bar{G}\supset\bar{G}_1\supset\bar{G}_2\supset\cdots$；$G$ 有 N 个不等价的不可约表示 ν，$\bar{G}$ 也如此等等．

(3) $\bar{G}$ 和 G 的 CSCO-I 相等．

$$\bar{C}=C.\tag{3-141}$$

证明如下：根据内禀群定义有

$$\bar{C}_iR=(\sum_l\bar{R}_l^{(i)})R=R\sum_l R_l^{(i)}=RC_i.\tag{3-142}$$

另一方面，类算符和任一群元对易，$C_iR=RC_i$，所以

$$\bar{C}_iR=C_iR.\tag{3-143}$$

由于 R 是任意的，所以 $\bar{C}_i=C_i$，因此(3-141)式成立．

由此立即可知，若 $\psi^{(\nu)}$ 属于群 G 的 $IR(\nu)$，则它也必属于内禀群 $\bar{G}$ 的 $IR(\nu)$；若 $P^{(\nu)}$ 是 C 的本征算符，则必定也是 $\bar{C}$ 的本征算符，即 $P^{(\nu)}$ 不仅是 G 的 $IR(\nu)$ 投影算符，也是 $\bar{G}$ 的 $IR(\nu)$ 投影算符．

(4) 由(3-134)式和(3-138)式看到，内禀群元算符在群空间 L_g 和群上函数空间都是幺正算符[例如(3-136)式表明，$D(\bar{G})$ 为幺正表示，$D^{-1}(\bar{R})=D(\bar{R}^{-1})=D^{\dagger}(\bar{R})=\tilde{D}(\bar{R})$]．

5. 几点注意

(1) 由 $\bar{R}S=SR$ 我们得到

$$\bar{R}=SRS^{-1},\ \text{当}\ \bar{R}\ \text{作用在}\ S\ \text{上}.\tag{3-144}$$

对此式的正确理解应是：$\bar{R}$ 作用于 S 时，等价于 SRS^{-1}，但是如果 $\bar{R}$ 作用于另一元素 T，则它又等价于 TRT^{-1}，即(3-144)式中的 S 不是一个固定的元素，而是一个动态元素，这是内禀群的最重要特性，因此(3-144)式不是一个算符恒等式．

(2) 切勿把(3-144)式和共轭元素定义相混．给定一个元素 R，我们用群 G 的所有元素 S_i 作 $S_iRS_i^{-1}$，得出 R 的全部共轭元素，即

$$R_i=S_iRS_i^{-1},\ (i=1,\ 2,\ \cdots,\ g).\tag{3-145}$$

上式是一个算符恒等式，R_i 永远等于 $S_iRS_i^{-1}$，R_i 仍然属于群 G．另一方面，$\bar{R}$ 却和 G 中任何元素都对易，它不属于群 G．(而 R_i 当然不会和所有群元都对易，除非 G 是阿贝尔群)．

(3) 不要把内禀群和相似群相混．相似群是由群 G 中一个选定的元素 S_0 对全体元素进行共轭运算产生的群 G 的同构映象 G'：

$$R'=S_0RS_0^{-1},\ \ R'\in G'.\tag{3-146}$$

(4) 注意区分群 G 的内禀群 $\bar{G}$ 的子群 $\bar{G}_1$，和群 G 的子群 G_1 的内禀群 $\bar{G}'_1$. $\bar{G}_1$ 是在群空间 L_g 上定义的算符，而 $\bar{G}'_1$ 是在 G_1 的群空间 Lg_1 上定义的算符. 用 $\{R\}$, $\{a\}$, $\{\bar{a}\}$ $\{\bar{a}'\}$ 分别代表 G, G_1, $\bar{G}_1$ 和 $\bar{G}'_1$ 的元素，则

$$\bar{a}R = Ra, \ R\in G, \tag{3-147}$$

$$\bar{a}'b = ba, \ b\in G_1. \tag{3-148}$$

由前面讨论可知，$\bar{G}_1$ 和 G_1 的 CSCO-I 不相等而互相对易，而 $\bar{G}'_1$ 和 G_1 的 CSCO-I 相等. 注意 $\bar{G}'_1$ 不是内禀群 $\bar{G}$ 的子群. $\bar{G}'_1$ 和群 G 不对易，只和群 G 的子群 G_1 对易. 综上所述，我们有

$$[\bar{G}_1, G]=0, \ [\bar{G}'_1, G]\neq 0, \ [\bar{G}'_1, G_1]=0.$$

6. 内禀态(正则表示情形)

前面已规定了内禀群元 $\bar{R}$ 对群空间矢量和对群上函数的作用，现在来规定 $\bar{R}$ 对组态空间波函数 $\varphi(X)$ 的作用. $\bar{R}$ 对 $\varphi(X)$ 的作用比较复杂，我们需要先引进'内禀态'的概念.

设 $\Phi_0(X)$ 为组态空间一个没有任何对称性的波函数[1]，在 g 个群元作用下得到 g 个互相正交的波函数

$$\varphi_a(X)=R_a\Phi_0(X), \quad a=1, 2, \cdots, g. \tag{3-149}$$

$\{\varphi_a\}$ 荷载群 G 的正则表示.

前面说过，$\bar{R}S=S\bar{R}$ 不是一个算符恒等式，因此它作用在这 g 个 $\varphi_a(X)$ 上不能同时成立. 但是我们可以规定它作用在其中某一个态，例如 $\Phi_0(X)$ 上成立

$$\bar{R}S\Phi_0(X)=S\bar{R}\Phi_0(X). \tag{3-150}$$

令上式中 S 为幺元素得

$$\bar{R}\Phi_0(X)=R\Phi_0(X)=\Phi_0(R^{-1}X). \tag{3-151}$$

最后一步利用了(2-58)式.

这样就规定了 $\bar{R}$ 对某一个特定态 $\Phi_0(X)$ 的作用. 以后称这个预先选定的态 $\Phi_0(X)$ 为内禀态(第六章中将进一步阐明内禀态及(3-151)式的物理意义). (3-151)式表明，对内禀态而言，R 和 $\bar{R}$ 的作用是等价的.

由(3-127)式和(3-151)式就可确定 $\bar{R}$ 对任一 $\varphi_a(X)=R_a\Phi_0(X)$ 的作用：

$$\bar{R}\varphi_a(X)=\bar{R}R_a\Phi_0(X)=R_aR\Phi_0(X). \tag{3-152}$$

注意

$$\bar{R}\varphi_a(X)\neq R\varphi_a(X)=RR_a\Phi_0(X). \tag{3-153}$$

那么究竟选哪一个态作为内禀态呢？原则上说可以选任一个态作为内禀态. 但一经选定，在整个分析过程中它不能再变. 在某些情况下，内禀态的选取和表象选取密切相关[11]. 以置换群 S_3 为例，令 u, d, s 为三种层子，六个 3-层子乘积态 $\varphi_a(X)=|uds\rangle$, $|dus\rangle$, $|dsu\rangle$, $|sdu\rangle$, $|sud\rangle$, $|dsu\rangle$，构成 S_3 群的正则表示的基. 基本粒子 SU_3 模型中有三种表象，这三种表象下对应的内禀态为

$$\begin{aligned}
&(a)\ I(\text{同位旋})\text{表象} \quad \Phi_0(I)=|uds\rangle,\\
&(b)\ U\ \text{旋表象} \quad \Phi_0(U)=|dsu\rangle,\\
&(c)\ V\ \text{旋表象} \quad \Phi_0(V)=|sud\rangle.
\end{aligned} \tag{3-154}$$

几种表象间的变换关系见(3-226c)式.

---

1) 对更一般的非正则表示情形，见§3.13.

由于内禀群元对组态空间波函数的作用(3-152)式和内禀态 Φ_0 的选取有关，因此内禀量子数的意义也和内禀态有关．详见§3.10.

集体转动模型中，Φ_0 即为核物理中的内禀态(变形场中的Hartree-Fock态或Elliott模型中的主态)，不同 Φ_0 的选取对应于内禀坐标轴相对于形变核的不同取向(详见第六章).

例：求 $\bar{S}_3$ 群元素$(\overline{12})$对表3.6-1中六个态的作用，选 $|\alpha\beta\gamma\rangle$ 为内禀态 $\Phi_0(X)$．由(2-70)式和(3-152)式可作出下表

表 3.7

φ_a	$\varphi_1=\Phi_0$ $\|\alpha\beta\gamma\rangle$	$\varphi_2=(12)\Phi_0$ $\|\beta\alpha\gamma\rangle$	$\varphi_3=(13)\Phi_0$ $\|\gamma\beta\alpha\rangle$	$\varphi_4=(23)\Phi_0$ $\|\alpha\gamma\beta\rangle$	$\varphi_5=(123)\Phi_0$ $\|\gamma\alpha\beta\rangle$	$\varphi_6=(132)\Phi_0$ $\|\beta\gamma\alpha\rangle$
$(\overline{12})\varphi_a$	$(12)\Phi_0$ $\|\beta\alpha\gamma\rangle$	Φ_0 $\|\alpha\beta\gamma\rangle$	$(13)(12)\Phi_0$ $\|\gamma\alpha\beta\rangle$	$(23)(12)\Phi_0$ $\|\beta\gamma\alpha\rangle$	$(123)(12)\Phi_0$ $\|\gamma\beta\alpha\rangle$	$(132)(12)\Phi_0$ $\|\alpha\gamma\beta\rangle$

从表3.7看到，内禀群元$(\overline{12})$对 φ_a 的作用等价于态置换 $\mathscr{P}_{12}$，即交换态指标 α, β．这不是偶然的巧合，下面将证明，态置换群 $\mathscr{S}_n$ 本质上就是内禀置换群 $\bar{S}_n$ 在 n-粒子乘积态空间的一种具体表现.

7．内禀置换群和态置换群

下面证明，若选(3-106)式的正序态 $|\omega_0\rangle=|i_1i_2\cdots i_n\rangle$ 为内禀态，则内禀置换算符和态置换算符互逆

$$\bar{p}=\mathscr{P}^{-1}. \tag{3-155}$$

证明：根据内禀态定义(3-151)式有

$$\bar{p}|\omega_0\rangle=p|\omega_0\rangle. \tag{3-156}$$

利用 S_n 群和 $\bar{S}_n$ 群对易，S_n 群和 $\mathscr{S}_n$ 群对易，以及(3-110)式，得

$$\bar{p}\varphi_a=\bar{p}p_a|\omega_0\rangle=p_ap|\omega_0\rangle=p_a\mathscr{P}^{-1}|\omega_0\rangle=\mathscr{P}^{-1}p_a|\omega_0\rangle=\mathscr{P}^{-1}\varphi_a. \tag{3-157}$$

因 φ_a 为任一个态，所以(3-155)式成立．因此以后对 $\{p|\omega_0\rangle\}$ 这种 n-粒子乘积波函数，我们总是用意义更简明的态置换代替内禀置换群处理问题.

还要指出一点，选正序态 $|\omega_0\rangle=|i_1i_2\cdots i_n\rangle$ 为内禀态的另一好处是这样所得的内禀量子数可和酉群的量子数直接联系起来(见§7.5).

由于置换群的类为ambivalent类(R 和 R^{-1} 属于同一类)，由(3-155)式可知，$\bar{S}_n$ 群和 $\mathscr{S}_n$ 群的类算符都相等，它们相对应的子群 $\bar{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_i$ 的类算符也相等，因此 $\bar{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_i$ 的CSCO-I也相等

$$\bar{C}(i)=\mathscr{C}(i),\quad i=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2. \tag{3-158}$$

§3.8 群 G 的CSCO-II和CSCO-III

现在要把§3.4和§3.6对 S_3 群特例所作的讨论推广到任意有限群 G．首先将群空间 L_g 按群 G 的CSCO-I C 的本征空间进行分解．令 C 在 L_g 空间中的本征矢量为

$$\mathring{P}^{(\nu)}=\sum_{a=1}^{g}u_{\nu a}R_a. \tag{3-159}$$

$$C\mathring{P}^{(\nu)}=\nu\mathring{P}^{(\nu)}. \tag{3-160}$$

写成矩阵方程为

$$\sum_{b=1}^{g}(C_{ab}-\nu\delta_{ab})u_{\nu b}=0. \tag{3-161}$$

矩阵 $\|C_{ab}\|_1^g$ 为算符 C 在'正则表象'中的矩阵表示

$$CR_b=\sum_{a=1}^{g}C_{ab}R_a, \quad C_{ab}=\langle R_a|C|R_b\rangle\equiv(R_a,\ CR_b). \tag{3-162}$$

C 在 N 维类空间中为完备，在 g 维群空间中不再完备，但本征值仍只有类空间中决定的 N 个 $\nu_1,\ \cdots,\ \nu_N$，只不过每个本征值有不同程度的简并。设 ν_i 的简并度为 M_{ν_i}，由(3-161)式和(2-37)式可知

$$\det\|C_{ab}-\nu\delta_{ab}\|_1^g=\prod_{i=1}^{N}(\nu-\nu_i)^{M_{\nu_i}}=0. \tag{3-163}$$

$$\sum_{i=1}^{N}M_{\nu_i}=g. \tag{3-164a}$$

属于同一本征值 ν_i 的所有本征矢量 $\hat{P}^{(\nu)}$ 构成 C 的一个本征空间 L_{ν_i}，该空间的维数即为 ν_i 的简并度 M_{ν_i}。现在群空间分解成了 C 的 N 个本征空间的直和

$$L_g=\sum_{\nu=1}^{N}\oplus L_\nu. \tag{3-164b}$$

为了消除简并，我们必须在原来的 CSCO-I 上加上一些新算符，使得它们构成 g 维空间的 CSCO. 这些新算符必须和 C 对易，也必须互相对易. 如果群 G 中包含子群链 $G\supset G(s)$，$G(s)\equiv G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$，则 $G(s)$ 中各子群 $G(s_i)$ 的完备算符集 $C(s_i)$ 都互相对易且和 C 对易. 我们用 $C(s)$ 表示由子群链 $G(s)$ 中所有子群的 CSCO-I 所构成的算符集，$C(s)\equiv(C(s_1),\ C(s_2),\ \cdots)$. 根据 § 3.7 的讨论，上述结果均可搬到内禀群 $\bar{G}$ 上去，对应地有群链 $\bar{G}\supset\bar{G}(s)$，$\bar{G}(s)\equiv\bar{G}(s_1)\supset\bar{G}(s_2)\cdots$ 和算符集 $\bar{C}(s)=(\bar{C}(s_1),\bar{C}(s_2),\cdots)$. 若 $G(s_1)$ 的 CSCO $C(s_1)$ 由 $G(s_1)$ 的类算符 $C_a=\sum_{i=1}^{g_a}R_i^{(a)}$，$\alpha=\alpha_0,\ \beta_0,\ \cdots$ 所组成，则 $\bar{G}(s_1)$ 的 CSCO $\bar{C}(s_1)$ 由对应的内禀类算 $\bar{C}_a=\sum_{i=1}^{g_a}\bar{R}_i^{(a)}$，$\alpha=\alpha_0,\ \beta_0,\ \cdots$ 所组成. $\bar{C}(s)$ 不但和 C 对易，而且也和 $C(s)$ 对易：

$$[C(s),\ \bar{C}(s)]=0. \tag{3-165}$$

虽然 G 和 $\bar{G}$ 的 CSCO 相等，$\bar{C}=C$，$\bar{C}$ 不提供新的算符，但 $\bar{C}(s)\neq C(s)$，$\bar{C}(s)$ 提供了新的算符. 并且由于 $\bar{G}$ 和 G 反同构，它们对应的子群 $\bar{G}(s_i)$ 和 $G(s_i)$ 也反同构，且具有相同的结构常数. 我们从群 G 出发，沿着群链往下找，直至找到 g 维群空间完备算符集 K 为止

$$K=(C,\ C(s),\ \bar{C}(s)). \tag{3-166}$$

$$C(s)=(C(s_1),\ C(s_2),\ \cdots),\ \bar{C}(s)=(\bar{C}(s_1),\ \bar{C}(s_2),\ \cdots). \tag{3-167}$$

我们称 K 为**群 G 的第三类完备算符集**(CSCO-III)，它在群空间有 g 套不同的本征值

$$\lambda=(\nu,\ m,\ k), \tag{3-168}$$

$$m=(\lambda(s_1),\ \lambda(s_2),\ \cdots),\ k=(\bar{\lambda}(s_1),\ \bar{\lambda}(s_2),\ \cdots).$$

这里 $\lambda(s_i)$ $(\bar{\lambda}(s_i))$ 为算符 $C(s_i)$ $(\bar{C}(s_i))$ 的本征值. 对每一个 λ，有也只有一个本征矢量.

和 (3-166) 式相对应的群链 $G\supset G(s)$ (即 $G\supset G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$) 称为**正则子群链**(Canonical subgroup chain)，而算符集 $(C,\ C(s))$ 则称为**群 G 的第二类完备算符集**(CSCO-II)；$(\bar{C},\ \bar{C}(s))$ 称为内禀群 $\bar{G}$ 的 CSCO-II. 关于 CSCO-II 的进一步讨论见 § 3.13.

对于任意给定的一个群，虽然我们还无法证明它一定存在正则子群链，但对于物理上碰到的一些有限群——如点群(见第八章)和置换群(见第四章)，却很容易找到各自的正则子

群链．例如置换群 S_n 的正则子群链为

$$S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_3 \supset S_2.$$

有时还存在不止一条正则子群链，例如 S_n 的另一条正则链为

$$S_n \supset (S_{n-2} \supset S_{n-3} \supset \cdots \supset S_3) \otimes S_2(n-1,\ n).$$

这里 $S_2(n-1,\ n)$ 为指标 $n-1$ 和 n 的置换群 S_2，而 $S_i = S_i(1,\ 2,\ \cdots,\ i)$。

还有一点要特别强调的是，在很多情形下，算符集 $(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 是过完备的，即为了构成群空间的完备算符集（即群 G 的 CSCO-III），我们往往不需要 $(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 中的所有算符．例如在 § 3.9 习题 3、4 中，我们会看到 $(C',\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 可以构成泡利矩阵群或 $\mathscr{C}_{4v}$ 群的 CSCO-III，这里 C' 只是组成 CSCO-I 的部份算符．换言之，即使 C' 不是群 G 的 CSCO-I，$(C',\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 仍有可能是群 G 的 CSCO-III．在 § 4.5，对置换群，我们会再次遇到这种情形。

§ 3.9　正则表示的完全分解

1．CSCO-III 的共同本征矢量 $\hat{P}_m^{(\nu)k}$

用 $\hat{P}_m^{(\nu)k}$ 代表 CSCO-III 的共同本征矢，它满足以下本征方程：

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} \hat{P}_m^{(\nu)k} = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} \hat{P}_m^{(\nu)k}, \qquad \hat{P}_m^{(\nu)k} = \sum_{a=1}^{g} u_{\nu mk,\,a} R_a. \tag{3-169a}$$

根据 $\bar{R}S = S R$，(3-169a) 式中的第三个式子可写成

$$\bar{C}(s) \hat{P}_m^{(\nu)k} = \hat{P}_m^{(\nu)k} C(s) = k \hat{P}_m^{(\nu)k}, \tag{3-169b}$$

这里 $m(k)$ 代表 $C(s)\ (\bar{C}(s))$ 的一串本征值［见 (3-168) 式］．下面我们证明，在 C 的本征空间 L_ν 中，$C(s)$ 和 $\bar{C}(s)$ 具有相同的本征值．为此只需证明在 L_ν 空间中，$C(s)$ 的转置算符 $\tilde{C}(s)$ 和内禀算符 $\bar{C}(s)$ 的表示矩阵为相似矩阵，即 $\mathscr{D}^{(\nu)}(\tilde{A}) = \tilde{\mathscr{D}}^{(\nu)}(A) \sim \mathscr{D}^{(\nu)}(\bar{A})$．令 $A = C(s)$，$\bar{A} = \bar{C}(s)$，令 L_ν 空间中的 M_ν 个基矢为

$$\varphi_i = \sum_a v_{ia} R_a, \quad i = 1,\ 2,\ \cdots,\ M_\nu \tag{3-170a}$$

$$C\varphi_i = \nu \varphi_i. \tag{3-170b}$$

利用 (3-137e) 式，可得

$$\langle \varphi_i | \bar{A} | \varphi_j \rangle = \sum_{ab} \langle v_{ia} a | \bar{A} | v_{jb} b \rangle = \sum_{ab} v_{ia}^* v_{jb} \langle b^{-1} | A | a^{-1} \rangle = \langle \varphi'_j | A | \varphi'_i \rangle, \tag{3-170c}$$

这里
$$\varphi'_i = \sum_a v_{ia}^* R_a^{-1}.$$

将 (3-171b) 式取厄米共轭，并利用 C 为自厄和 R_a 为幺正，得到

$$C\varphi'_i = \nu \varphi'_i. \tag{3-171}$$

这表明 $\varphi'_i \in L_\nu$，因此 φ'_i 必可表为 M_ν 个 φ_i 的线性组合．于是 (3-171c) 式告诉我们，在 L_ν 空间中，$\bar{A}$ 和 $\tilde{A}$ 的表示矩阵为相似矩阵，证毕．于是矩阵 $\mathscr{D}^{(\nu)}(\bar{A})$ 和 $\tilde{\mathscr{D}}(A)$ 具有相同的特征值．另一方面，$\tilde{\mathscr{D}}^{(\nu)}(A)$ 和 $\mathscr{D}^{(\nu)}(A)$ 又有相同的特征值，因此 $\mathscr{D}^{(\nu)}(\bar{A})$ 和 $\mathscr{D}^{(\nu)}(A)$ 具有相同的特征值．因此本征空间 L_ν 的维数 M_ν 一定是一个正整数 h_ν 的平方，$C(s)$ 和 $\bar{C}(s)$ 在 L_ν 中具有相同的 h_ν 套本征值．即

$$m,\ k = m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_{h_\nu}, \tag{3-172a}$$

$$h_\nu=\sqrt{M_\nu},\tag{3-172b}$$

这告诉我们$(C(s),\ \bar{C}(s))$是本征空间 L_ν 的 CSCO.

由(3-164a)式和(3-172b)式得

$$g=\sum_{i=1}^{N}h_{\nu_i}^2.\tag{3-173}$$

$\bar{C}(s)$和群 G 对易，它把群 G CSCO-I 的本征空间 L_ν 分解成 G 的 h_ν 个表示空间 $L_{(\nu)k}$，于是(3-164b)变成

$$L_g=\sum_{\nu=1}^{N}\sum_{k=1}^{h_\nu}\oplus L_{(\nu)k}.\tag{3-174}$$

(这里以及后面我们常用 $\nu,\ m,\ k$ 既代表本征值又代表该本征值的编号.) $(\mathring{P}_1^{(\nu)k},\ \mathring{P}_2^{(\nu)k},\ \cdots,\ \mathring{P}_{h_\nu}^{(\nu)k})$构成群 G 第 k 个表示空间 $L_{(\nu)k}$，维数为 h_ν.

前面讨论中，我们假设 $G\supset G(s)$为正则子群链. 如果 $G\supset G(s)$ 不是正则子群链，则 $(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$在群空间的本征值的个数小于 g. 这时对应于一套本征值(ν, m, k)，(3-169a)的解 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 不唯一. 我们必需引入附加量子数来区分这些简并的本征解. 根据 Dirac 书 § 14，原则上说，我们总可在原来算符集$(C, C(s), \bar{C}(s))$上增添一些新的对易算符，使它成为群空间的完备算符集. 假定 ξ 是已经找到的一个附加算符. 作用在群空间的算符 ξ 一定可表为群算符的线性组合，$\xi=\sum_a\xi_aR_a$，这里 ξ_a 为系数. 有了算符 ξ，必有对应的内禀算符 $\bar{\xi}=\sum_a\xi_a\bar{R}_a$. 因此这些附加算符必定是成对出现的. 由此可得出结论，即使 $G\supset G(s)$不是正则子群链，我们仍然可以找到群 G 的 CSCO-III$(C,\ C'(s),\ \bar{C}'(s))$，这里 $C'(s)=(C(s),\ \xi,\ \eta,\ \cdots)$，$\bar{C}'(s)=(\bar{C}(s),\ \bar{\xi},\ \bar{\eta},\ \cdots)$，$\xi,\ \eta,\ \cdots$ 等为附加算符.

由此可见，我们在前面的讨论对非正则子群链也仍然成立，只要把 $C(s)(\bar{C}(s))$理解成 $C'(s)(\bar{C}'(s))$.

由于内禀群 $\bar{G}$ 和群 G 的地位是等价的，群空间 L_g 也可按内禀群 $\bar{G}$ 的不可约空间进行分解. 因为 $\bar{C}=C$，所以 $L_{(\nu)}$ 也是群 $\bar{G}$ 的 CSCO-I 的本征空间，因此构成群 $\bar{G}$ 的一个表示空间. 利用 $C(s)$可把 L_ν 进一步分解成 $\bar{G}$ 的 h_ν 个表示空间 $\bar{L}_{(\nu)m}$($\bar{L}_{(\nu)m}$ 为$(C,\ C(s))$的本征空间)，于是

$$L_g=\sum_{\nu=1}^{N}\sum_{m=1}^{h_\nu}\oplus\bar{L}_{(\nu)m}.\tag{3-175}$$

而 $(\mathring{P}_m^{(\nu)1},\ \mathring{P}_m^{(\nu)2}\cdots\mathring{P}_m^{(\nu)h_\nu})$构成群 $\bar{G}$ 的第 m 个表示空间 $\bar{L}_{(\nu)m}$，维数为 h_ν.

本征方程(3-169a)写成矩阵形式为:

$$\sum_{b=1}^{g}\left[\left\langle a\left|\begin{matrix}C\\C(s)\\\bar{C}(s)\end{matrix}\right|b\right\rangle-\begin{pmatrix}\nu\\m\\k\end{pmatrix}\delta_{ab}\right]u_{\nu mk,b}=0.\tag{3-176}$$

这里 $\langle a|C|b\rangle=(R_a,\ CR_b)=C_{ab}$，以及

$$C(s)R_b=\sum_a\langle a|C(s)|b\rangle R_a,\tag{3-177}$$

$$\bar{C}(s)R_b=R_bC(s)=\sum_a\langle a|\bar{C}(s)|b\rangle R_a.\tag{3-178}$$

CSCO-III 的本征矢量构成正交归一完备系

$$\langle\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\mathring{P}_{m'}^{(\nu')k'}\rangle=\delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{kk'},\tag{3-179a}$$

$$\sum_{\nu mk}|\mathring{P}_m^{(\nu)k}\rangle\langle\mathring{P}_m^{(\nu)k}|=1.\tag{3-179b}$$

由(3-170)式,可将以上式子表为:

$$\sum_a u^*_{\nu mk,a}u_{\nu' m' k',a}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{kk'}, \tag{3-180a}$$

$$\sum_{\nu mk} u^*_{\nu mk,a}u_{\nu mk,b}=\delta_{ab}. \tag{3-180b}$$

利用(3-180b),得到(3-169a)式的逆展开

$$R_a=\sum_{\mu ji} u^*_{\mu ji,a}\mathring{P}^{(\mu)i}_j. \tag{3-181}$$

此外,可以证明

$$\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\sqrt{\frac{g}{h_\nu}}\,\delta_{\nu\mu}\delta_{im}\mathring{P}^{(\nu)k}_j. \tag{3-182}$$

证明如下:

因为 C 和群元对易,因而和 $\mathring{P}^{(\mu)i}_j$ 对易,我们有

$$C\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\mu\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\mathring{P}^{(\mu)i}_jC\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\nu\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m,$$

所以

$$(\nu-\mu)\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=0. \tag{3-183}$$

由(3-169)式知

$$C(s)\,(\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m)=j\,(\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m), \tag{3-184}$$

$$\bar{C}(s)\,(\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m)=\mathring{P}^{(\mu)i}_j\bar{C}(s)\mathring{P}^{(\nu)k}_m=k\,(\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m). \tag{3-185}$$

此外再利用

$$\mathring{P}^{(\mu)i}_jC(s)\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\mathring{P}^{(\mu)i}_j(C(s)\mathring{P}^{(\nu)k}_m)=m\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=(\mathring{P}^{(\mu)i}_jC(s))\mathring{P}^{(\nu)k}_m=i\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m.$$

因此

$$(m-i)\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=0. \tag{3-186}$$

由于 CSCO-III 的本征值不存在简并,上述结果意味着

$$\mathring{P}^{(\mu)i}_j\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\delta_{\nu\mu}\delta_{im}(\xi^\nu_{mjk})^{-1}\mathring{P}^{(\nu)k}_j, \tag{3-187}$$

这里 ξ^ν_{mjk} 为一常数.

将(3-181)式的 R_a 作用在 $\mathring{P}^{(\nu)k}_m$ 上并利用(3-187)式得

$$R_a\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\sum_j D^{(\nu)k}_{jm}(R_a)\,\mathring{P}^{(\nu)k}_j, \tag{3-188a}$$

$$D^{(\nu)k}_{jm}(R_a)=(\xi^\nu_{mjk})^{-1}u^*_{\nu jm,a} \tag{3-188b}$$

(3-188)式表明 $\mathring{P}^{(\nu)k}_m(m=1,\ 2,\ \cdots h_\nu)$ 构成群 G 第 k 个 ν 表示的基底,表示矩阵为 $D^{(\nu)k}(R_a)$.类似地,对群 $\bar{G}$ 我们有

$$\bar{R}_a\mathring{P}^{(\nu)k}_m=\sum_i D^{(\nu)m}_{ik}(\bar{R}_a)\,\mathring{P}^{(\nu)i}_m, \tag{3-189a}$$

$$D^{(\nu)m}_{ik}(\bar{R}_a)=(\xi^\nu_{kmi})^{-1}u^*_{\nu ki,a}. \tag{3-189b}$$

(3-189) 式表明 $\mathring{P}^{(\nu)k}_m$ ($k=1,\ 2,\ \cdots,\ h_\nu$) 构成群 $\bar{G}$ 的第m个 ν 表示的基底,表示矩阵为 $D^{(\nu)m}(\bar{R}_a)$.

利用 $\mathring{P}^{(\nu)k}_m$ 的正交归一性(3-179a),由(3-188a)和(3-189a)得到

$$D^{(\nu)k}_{jm}(R_a)=\langle\mathring{P}^{(\nu)k}_j|R_a|\mathring{P}^{(\nu)k}_m\rangle, \tag{3-188c}$$

$$D^{(\nu)m}_{ik}(\bar{R}_a)=\langle\mathring{P}^{(\nu)i}_m|\bar{R}_a|\mathring{P}^{(\nu)k}_m\rangle. \tag{3-189c}$$

2. 属于同一本征值 ν 的表示 $D^{(\nu)k}$ 的等价性

下面证明,群 G 的 h_ν 个表示 $D^{(\nu)1}$, $D^{(\nu)2}$, $\cdots$, $D^{(\nu)h_\nu}$ 互相等价. 为此首先证明,若将 $D^{(\nu)k}_{jm}(R_a)^*$ 看成群上函数,则它是 CSCO-III 的本征函数.

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \overline{C}(s) \end{pmatrix} D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* \tag{3-190}$$

证明：为简化书写，假定子群链 $G(s)$ 只包含一个子群，并且 $C=C_i$，$C(s)=C_s$，$\overline{C}(s)=\overline{C}_s$ 都只包含一个类算符. 令

$$C_i = \sum_{l=1}^{g_i} R_l$$

这里 R_l 代表 i 类的第 l 个算符. 利用 $R_l D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* = D_{jm}^{(\nu)k}(R_l^{-1}R_a)^*$ 以及表示 $D^{(\nu)k}$ 为幺正表示，得到

$$C_i D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* = \sum_{l=1}^{g_i} D_{jm}^{(\nu)k}(R_l^{-1}R_a)^* = \sum_{j'} \left[\sum_{l=1}^{g_i} D_{jj'}^{(\nu)k}(R_l^{-1})^*\right] D_{j'm}^{(\nu)k}(R_a)^*$$
$$= \sum_{j'} D_{jj'}^{(\nu)k}(C_i) D_{j'm}^{(\nu)k}(R_a)^* = \nu D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^*$$

最后一步利用了类算符 C_i 在空间 L_ν 中为单位矩阵的 ν 倍. 类似地有

$$C_s D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* = \sum_{j'} D_{jj'}^{(\nu)k}(C_s) D_{j'm}^{(\nu)k}(R_a)^* = j D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^*.$$

$$\overline{C}_s D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^* = \sum_{m'} D_{jm'}^{(\nu)k}(R_a)^* D_{mm'}^{(\nu)k}(C_s) = m D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^*.$$

因此(3-190)式成立.

由于 CSCO-III 是群上函数空间的完备算符集，因此对给定量子数(ν, j, m)，(3-190)式的本征解 $D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)^*$ 除位相因子外是唯一的. 于是 $D_{jm}^{(\nu)k}(R_a)$ 和 $D_{jm}^{(\nu)k'}(R_a)$ 至多只相差一个位相因子 $\epsilon(\nu, j, m, k, k') \equiv \epsilon(j, m)$，即

$$D_{jm}^{(\nu)k'}(R_a) = \epsilon(j, m) D_{jm}^{(\nu)k}(R_a). \tag{3-191a}$$

令上式 $R_a \to R_a^{-1}$，并利用 D 的幺正性得

$$D_{mj}^{(\nu)k'}(R_a)^* = \epsilon(j, m) D_{mj}^{(\nu)k}(R_a)^* \tag{3-191b}$$

比较(3-191a)和(3-191b)，得到

$$\epsilon(j, m) = \epsilon(m, j)^*. \tag{3-192a}$$

令(3-191a)式中 $R_a \to R_a R_b$，得到

$$\sum_l \epsilon(j, l)\epsilon(l, m) D_{ml}^{(\nu)k}(R_a) D_{lj}^{(\nu)k}(R_b) = \epsilon(j, m) \sum_l D_{ml}^{(\nu)k}(R_a) D_{lj}^{(\nu)k}(R_b).$$

上式两边乘以 $u_{\nu ml', a}$，对 a 求和，并利用(3-188b)和(3-180a)式可得

$$\epsilon(j, l)\epsilon(l, m)\xi_{lmk}^{(\nu)} D_{lj}^{(\nu)k}(R_b) = \epsilon(j, m)\xi_{lmk}^{(\nu)} D_{lj}^{(\nu)k}(R_b).$$

因而

$$\epsilon(j, m) = \epsilon(j, l)\epsilon(l, m) \tag{3-192b}$$

由(3-192a)和(3-192b)可知

$$\epsilon(j, m) = \epsilon(j)^*\epsilon(m) \tag{3-192c}$$

这里 $\epsilon(m)$，$m=1, 2, \cdots, h_\nu$ 为位相因子，其中之一，如 $\epsilon(1)$ 可选为 $+1$. 由于性质(3-192b)，相因子 $\epsilon(j, m)$ 中只有以下 $h_\nu - 1$ 个是独立的，它们可选为

$$\epsilon(j, j+1), \quad j=1, 2, \cdots, h_\nu - 1. \tag{3-192d}$$

利用(3-192c)可求出 $h_\nu - 1$ 个相因子 $\epsilon(2)\cdots\epsilon(h_\nu)$. 于是可作出以下对角矩阵

$$T^* = B = \mathrm{diag}(\epsilon(1), \epsilon(2), \cdots, \epsilon(h_\nu)) \tag{3-193a}$$

而(3-191a)式可写成

$$D^{(\nu)k'}(R_a) = T D^{(\nu)k}(R_a) T^{-1}, \quad R_a \in G. \tag{3-193b}$$

因此 $D^{(\nu)k'}$ 和 $D^{(\nu)k}$ 等价. 证毕.

这就证明了由正则表示分解得到的具有相同本征值 ν 的表示必互相等价.

由(3-191a)和(3-192c)可知,如果将第 k 个表示 (ν) 的基矢作如下的幺正变换

$$\mathring{P}_m^{(\nu)k} \xrightarrow{B} \epsilon(m)\mathring{P}_m^{(\nu)k}, \quad m=1, 2, \cdots, h_\nu, \tag{3-194}$$

则 $\{\epsilon(m)\mathring{P}_m^{(\nu)k}\}$ 所荷载的表示不但和 $D^{(\nu)k'}$ 等价,而且和 $D^{(\nu)k'}$ 完全相同. 由此可知,通过调节相同 k, 不同 m 的本征矢 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 的位相,我们可以使得群 G 的 h_ν 个表示 $D^{(\nu)k}$, $k=1, 2, \cdots, h_\nu$ 变得完全相等,也就是说,使 $D^{(\nu)k}$ 和量子数 k 无关:

$$D^{(\nu)k}(G)=D^{(\nu)}(G). \tag{3-195a}$$

比较 (3-195a) 和 (3-188b) 可知, 系数 ξ_{mjk}^ν 对 k 的依赖关系仅仅是位相关系, $\xi_{mjk}^\nu=e^{i\varphi_k}\xi_{mj}^\nu$. 通过适当选取位相可使(3-195a)成立,这时 ξ_{mjk}^ν 就和 k 无关:

$$\xi_{mjk}^\nu=\xi_{mj}^\nu. \tag{3-196a}$$

于是(3-188b)和(3-189b)变成

$$D_{jm}^{(\nu)}(R_a)=(\xi_{mj}^\nu)^{-1}u_{\nu jm,a}^*, \tag{3-197a}$$

$$D_{lk}^{(\nu)m}(\bar{R}_a)=(\xi_{km}^\nu)^{-1}u_{\nu kl,a}^*. \tag{3-197b}$$

考虑到群 G 和 $\bar{G}$ 处于等价地位,以及分量指标 m, j, k 处于等价地位,可知 ξ_{mj}^ν 对 m 和 j 的依赖关系也仅仅是位相关系:

$$\xi_{mj}^\nu=e^{i\theta_m}e^{i\varphi_j}\xi^\nu. \tag{3-196b}$$

利用(3-197a), (3-196*b*)和(3-180a)可得

$$\sum_a|D_{jm}^{(\nu)}(R_a)|^2=|\xi^\nu|^{-2} \tag{3-196c}$$

下面证明在(3-195a)式成立时, $D^{(\nu)m}(\bar{G})$ 和 m 无关. 首先我们有

$$\begin{aligned}D_{lk}^{(\nu)m}(\bar{R}_a)&=\langle\mathring{P}_m^{(\nu)l}|\bar{R}_a|\mathring{P}_m^{(\nu)k}\rangle=\langle\mathring{P}_m^{(\nu)l}|R^{-1}\bar{R}_aR|\mathring{P}_m^{(\nu)k}\rangle\\&=\sum_{m'}|D_{m'm}^{(\nu)}(R)|^2D_{lk}^{(\nu)m'}(\bar{R}_a),\end{aligned} \tag{3-198a}$$

这里利用了(3-188a)和(3-195a).

将上式对 R 求和,并利用(3-196c),得到

$$D_{lk}^{(\nu)m}(\bar{R}_a)=\frac{1}{g}|\xi^\nu|^{-2}\sum_{m'}D_{lk}^{(\nu)m'}(\bar{R}_a). \tag{3-198b}$$

由此可知

(1) $$D^{(\nu)m}(\bar{G})=D^{(\nu)}(\bar{G}) \quad (\text{和}\ m\ \text{无关}), \tag{3-195b}$$

(2) $$|\xi^\nu|^2=\frac{h_\nu}{g}. \tag{3-196d}$$

因此当群 G 的 h_ν 个表示 $D^{(\nu)k}(G)$ 变成全等时,群 $\bar{G}$ 的 h_ν 个表示 $D^{(\nu)m}(\bar{G})$ 也变成完全一样. 对照(3-195b)和(3-197b),可知 ξ_{km}^ν 和 m 无关. 于是(3-197a, b)变成

$$D_{jm}^{(\nu)}(R_a)=(\xi_m^\nu)^{-1}u_{\nu jm,a}^* \tag{3-197c}$$

$$D_{mj}^{(\nu)}(\bar{R}_a)=(\xi_j^\nu)^{-1}u_{\nu jm,a}^* \tag{3-197d}$$

$$\xi_m^\nu=\sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\,e^{i(\theta_m+\theta_\nu)} \tag{3-196e}$$

由(3-197c, d)得到群 $\bar{G}$ 和 G 的不可约矩阵元的关系:

$$\langle\mathring{P}_l^{(\nu)m}|\bar{R}_a|\mathring{P}_l^{(\nu)j}\rangle=D_{mj}^{(\nu)}(\bar{R}_a)=\rho(m, j)D_{jm}^{(\nu)}(R_a), \tag{3-197e}$$

这里 $$\rho(m, j)=(e^{i\theta_m})^*e^{i\theta_j}.$$

类似于对(3-191a)式的讨论, 如果对所有的 l, 都作以下变换,

$$\mathring{P}_l^{(\nu)m} \longrightarrow e^{i\theta_m}\mathring{P}_l^{(\nu)m} \tag{3-197f}$$

则 $\{e^{i\theta_m}\mathring{P}_l^{(\nu)m}\}$ 所荷载的群 $\overline{G}$ 的表示 $D^{(\nu)}(\overline{G})$ 等于群 G 表示的转置

$$D^{(\nu)}(\overline{G}) = \widetilde{D}^{(\nu)}(G). \tag{3-195c}$$

比较(3-197c, d)和(3-195c)可知, 在以上选择下, ξ_m^ν 和 m 无关,

$$\xi^\nu = \sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\, e^{i\theta_\nu}. \tag{3-196f}$$

于是(3-187)式简化成

$$\mathring{P}_j^{(\mu)l}\mathring{P}_m^{(\nu)k} = \delta_{\nu\mu}\delta_{lm}e^{i\theta_\nu}\sqrt{\frac{g}{h_\nu}}\,\mathring{P}_j^{(\nu)k}.$$

令本征矢 $\mathring{P}_l^{(\nu)l}$ 中幺元素 e 之前的系数 $u_{\nu ll,e}$ 为正实数, 可使上式中的相因子 $e^{i\theta_\nu}=1$. 这样上式就过渡到我们要证明的(3-182)式, 而

$$\xi^\nu = \sqrt{\frac{h_\nu}{g}}. \tag{3-196g}$$

注意 为了达到(3-195a)式, 我们要对每一个 k 值做一次变换(3-194); 而为了达到(3-195c), 我们只要对所有的 l 做同样的变换(3-197f), 而变换(3-194)和(3-197f)是互相独立的.

综合(3-195)和(3-196)各式, (3-188), (3-189)和(3-170)可改写成:

$$R\mathring{P}_m^{(\nu)k} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(\nu)}(R)\mathring{P}_{m'}^{(\nu)k}, \quad k = m_1,\ m_2,\ \cdots\cdots,\ m_{h_\nu}. \tag{3-199a}$$

$$\overline{R}\mathring{P}_m^{(\nu)k} = \mathring{P}_m^{(\nu)k}R = \sum_{k'} D_{k'k}^{(\nu)}(\overline{R})\mathring{P}_m^{(\nu)k'}, \quad m = m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_{h_\nu}. \tag{3-199b}$$

$$D_{mk}^{(\nu)}(R_a) = D_{km}^{(\nu)}(\overline{R}_a) = \sqrt{\frac{g}{h_\nu}}\, u_{\nu mk,a}^*. \tag{3-200}$$

$$\mathring{P}_m^{(\nu)k} = \sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\sum_a D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)R_a \tag{3-201}$$

以后称满足上述四个式子的位相选取为合理的位相选择.

将(3-200)式代入(3-180)式, 得到 $D^{(\nu)}$ 表示的矩阵元所满足的两个正交定理

$$\frac{h_\nu}{g}\sum_a D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)D_{m'k'}^{(\nu')}(R_a) = \delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{kk'}, \tag{3-202a}$$

$$\sum_{\nu mk}\frac{h_\nu}{g}D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)D_{mk}^{(\nu)}(R_b) = \delta_{ab}. \tag{3-202b}$$

3. 表示 $D^{(\nu)}$ 的不可约性

现在我们来证明表示 $D^{(\nu)}(G)$ 为不可约. 设 $h_\nu\times h_\nu$ 矩阵 A 满足

$$AD^{(\nu)}(R_a) = D^{(\nu)}(R_a)A, \quad a=1,\ 2,\ \cdots,\ g. \tag{3-203a}$$

由上式可得

$$\sum_{m'} A_{mm'}D_{m'k}^{(\nu)}(R_a) = \sum_{m'} D_{mm'}^{(\nu)}(R_a)A_{m'k}. \tag{3-203b}$$

上式两边乘以 $\frac{h_\nu}{g}D_{lk}^{(\nu)*}(R_a)$, 对 a 求和, 利用(3-202a)式得到

$$A_{ml} = \delta_{ml}A_{kk}. \tag{3-203c}$$

因此满足(3-203)式的矩阵 A 只可能是单位矩阵的一个倍数. 根据§2.10不可约性判据, 我们知道表示 $D^{(\nu)}$ 必为不可约. 因此本节中前述种种结论中所用的术语表示(注意前面故意加的着重号)都应理解为'不可约表示'. 如(3-202)就是不可约矩阵的两个正交定理.

4. 正则表示分解定理

至此我们完成了群 G 正则表示的完全约化. 归纳起来,得到以下结论:

(a) 群 G 的完备算符集 C 把 g 维正则表示空间 L_g 分解成 N 个 h_ν^2 维不等价的表示空间 L_ν. $L_g=\sum_{\nu=1}^{N}\oplus L_\nu$. 这里 ν 既可理解为 C 的本征值,也可理解为不可约表示的标志或不可约表示的编号.

(b) 内禀子群链 $\bar{G}(s)$ 的完备算符集 $\bar{C}(s)$ 进一步把空间 L_ν 分解成群 G 的 h_ν 个互相等价的 h_ν 维 IR 空间 $L_{(\nu)k}$. $L_\nu=\sum_{k=1}^{h_\nu}\oplus L_{(\nu)k}$. 相应的 IR 基矢为 $\mathring{P}_1^{(\nu)k}$, $\mathring{P}_2^{(\nu)k}$, $\cdots$, $\mathring{P}_{h_\nu}^{(\nu)k}$. (3-199a)表明,在群 G 作用下, $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 只改变量子数 m. 这是理所当然的,因为$[R,\bar{C}(s)]=0$, R 不能改变 $\bar{C}(s)$的本征值 k.

(c) 类似地, 子群链 $G(s)$的完备算符集 $C(s)$ 把 L_ν 分解成内禀群 $\bar{G}$ 的 h_ν 个互相等价的 h_ν 维 IR 空间$\bar{L}_{(\nu)m}$, $L_\nu=\sum_{m=1}^{h_\nu}\oplus\bar{L}_{(\nu)m}$. $\bar{G}$ 的 IR 基矢为 $\mathring{P}_m^{(\nu)1}$, $\mathring{P}_m^{(\nu)2}$, $\cdots$, $\mathring{P}_m^{(\nu)h_\nu}$. (3-199b)表明,在群 $\bar{G}$ 作用下, $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 只改变内禀量子数 k.

(d) 群 G CSCO-III 的本征矢 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ $(m=(\lambda(s_1),\ \lambda(s_2),\ \cdots),\ k=(\bar{\lambda}(s_1),\ \bar{\lambda}(s_2)\cdots))$为 $G\supset G(s)$和 $\bar{G}\supset\bar{G}(s)IR$ 基, 它分别属于 $G\supset G(s_1)\supset G(s_2)\supset\cdots$的 IR ν, $\lambda(s_1)$, $\lambda(s_2)$, $\cdots$, 分别属于 $\bar{G}\supset\bar{G}(s_1)\supset\bar{G}(s_2)\supset\cdots$的 $IR\,\nu$, $\bar{\lambda}(s_1)$, $\bar{\lambda}(s_2)$, $\cdots$.

(e) (3-201)表明从可约基 $\{R_a\}$ 到 $G\supset G(s)$ 和 $\bar{G}\supset\bar{G}(s)$ 不可约基 $\{\mathring{P}_m^{(\nu)k}\}$ 的变换是一个幺正变换. 幺正变换矩阵元正比于 IR 矩阵的复共轭.

(f) 在正则表示空间,解 CSCO-III 的本征方程,既可求得 $G\supset G(s)$和 $\bar{G}\supset\bar{G}(s)$分类基 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$, 同时也求出了所有的不可约矩阵元 $D_{mk}^{(\nu)}(R_a)$.

(g) (3-173)就是正则表示分解定理, 即

定理 6 群 G 的正则表示包含了 N 个不等价的不可约表示, N 为群 G 的类的数目, 且每一不可约表示出现的次数等于该表示的维数.

例如对§3.6 讨论的 s_3 群, $g=6$, $N=3$. 共有三个不等价的 $IR\,\nu=3,\ 0,\ -3$, 维数分别为 1, 2, 1, 出现的次数分别为 1, 2, 1. (3-173)式变成 $6=1+2^2+1$.

这在一些简单情形下,根据定理 6 就可判断群 G 不可约表示的维数. 例如对阶数 g 为素数 (1, 3, 5, 7, 11, $\cdots$) 的群, 它的所有的 IR 必为一维的, 因此它必定是阿贝尔群. 又如对阶数为 8 的非阿贝尔群, 根据 $8=1+1+1+1+2^2$ 可知, 它有四个一维 IR 和一个二维 IR.

5. 调整位相的步骤

在求解 CSCO-III 的本征方程(3-176)时, 如果本征矢量的位相是自由选取的话, 则我们不能利用(3-200)式来求不可约矩阵元, 而必须利用(3-188c)和(3-189c)来求, 并且 IR 表示 $D^{(\nu)k}(G)$ 和 $D^{(\nu)m}(\bar{G})$ 分别和 k, m 有关. 这自然很不方便. 为了使(3-199)~(3-201)式成立, 因而可用(3-200)式从系数 $u_{\nu mk,a}$ 方便地写下 IR 矩阵元, 我们可根据以下规则来调节位相.

(a) 幺元素前的系数必须是正数以保证 $D^{(\nu)}(e)=I$(单位矩阵).

(b) 在属子群 G $IR(\nu)$的 h_ν 个等价表示中,某一个表示如第一个表示(内禀量子数编号 $k=1$)的基矢的相对位相可自由选取, 或根据习惯上的约定来选取.

(c) 根据(3-201)式，其余 $k\neq1$ 的本征矢量 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 的位相可这样来确定：选择一、二个群元 R_a，并利用位相已确定了的内禀量子数 $k=1$ 的 IR 基计算出这些群元的 IR 矩阵元

$$D_{mk}^{(\nu)}(R_a)=\langle\mathring{P}_m^{(\nu)1}|R_a|\mathring{P}_k^{(\nu)1}\rangle, \tag{3-204a}$$

然后调节本征矢

$$\mathring{P}_m^{(\nu)k}=\sum_{a'}u_{\nu mk,a'}R_{a'} \tag{3-204b}$$

的位相，使得 $u_{\nu mk,a}$ 和由(3-204a)算得的矩阵元 $D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)$ 差一个正的倍数。

6. 不可约矩阵元的性质

(3-190)式可写成

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\\\overline{C}(s)\end{pmatrix}D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)=\begin{pmatrix}\nu\\m\\k\end{pmatrix}D_{mk}^{(\nu)*}(R_a). \tag{3-205}$$

因此当 $D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)$ 被视为群上函数时，它也就是 $G\supset G(s)$ IR 基 (ν, m) 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$ IR 基 (ν, k). 这也可直接从群表示的定义导出

$$RD_{mk}^{(\nu)*}(R_a)=D_{mk}^{(\nu)*}(R^{-1}R_a)=\sum_{m'}D_{mm'}^{(\nu)*}(R^{-1})D_{m'k}^{(\nu)*}(R_a). \tag{3-206}$$

于是

$$RD_{mk}^{(\nu)*}(R_a)=\sum_{m'}D_{m'm}^{(\nu)}(R)D_{m'k}^{(\nu)*}(R_a). \tag{3-207}$$

$$\overline{R}D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)=D_{mk}^{(\nu)*}(R_aR^{-1})=\sum_{k'}D_{kk'}^{(\nu)}(R)D_{mk'}^{(\nu)*}(R_a). \tag{3-208}$$

由此可知，在群上函数空间，CSCO-III 的本征函数，$G\supset G(s)$ 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$ 的共同不可约基，和群 G 的不可约矩阵元的复共轭，三者是一回事。

对于 $G\supset G(s)$ 分类基，其不可约矩阵 $D^{(\nu)}(R)$ (见(3-200)式)具有一个重要特性，即当 R 为群 G 某一子群的一个元素时，$D^{(\nu)}(R)$ 为准对角(即取已约形式)。

假定子群链 $G(s)=G_f\supset G_{f-1}\supset\cdots\supset G_1$，$C(s)=(C(f)\cdots C(1))$，$C(s)$ 的本征值 $m=(\lambda_f\cdots\lambda_1)$. 根据

$$[C(j), R_i]=0,\quad j=f, f-1, \cdots, i,\quad R_i\in G_i, \tag{3-209}$$

可知 G_i 的群元 R_i 作用在 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 上不会改变 $C(f)\cdots C(i)$ 的本征值 $\lambda_f\cdots\lambda_i$. 由(3-199a)和(3-179a)式以及 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 为 $G\supset G(s)$ 分类基得

$$D_{m'm}^{(\nu)}(R_i)=\langle\mathring{P}_{m'}^{(\nu)k}|R_i|\mathring{P}_m^{(\nu)k}\rangle=\delta_{\lambda_f'\lambda_f}\cdots\delta_{\lambda_i'\lambda_i}D_{\overline{m}'\overline{m}}^{\lambda_i}(R_i). \tag{3-210}$$

这里

$$D_{\overline{m}'\overline{m}}^{(\lambda_i)}(R_i)=\langle\mathring{P}_{\overline{m}'}^{(\lambda_i)\overline{k}}|R_i|\mathring{P}_{\overline{m}}^{(\lambda_i)\overline{k}}\rangle, \tag{3-211}$$

$$\overline{m}=(\lambda_{i-1}, \lambda_{i-2}, \cdots, \lambda_1),\ \overline{m}'=(\lambda_{i-1}', \lambda_{i-2}', \cdots, \lambda_1'),$$

这里 $D_{\overline{m}'\overline{m}}^{\lambda_i}(R_i)$ 为子群 G_i 的 $IR(\lambda_i)$ 的矩阵元。

7. 广义不可约矩阵元

(3-205)式可推广到广义不可约矩阵元 $\mathscr{D}_{m\varkappa}^{(\nu)}(R_a)$,

$$\mathscr{D}_{m\varkappa}^{(\nu)}(R_a)=\langle\psi_m^{(\nu)}|R_a|\phi_\varkappa^{(\nu)}\rangle. \tag{3-212}$$

这里 $\psi_m^{(\nu)}$ 仍为 $G\supset G(s)$ 不可约基，而 $\phi_\varkappa^{(\nu)}$ 为 $G\supset G(s)'$ 不可约基，$G(s)'$ 为和 $G(s)$ 不同的子群链。类似地可证明 $\mathscr{D}_{m\varkappa}^{(\nu)}(R_a)$ 满足本征方程

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\\\overline{C}(s)'\end{pmatrix}\mathscr{D}_{m\varkappa}^{(\nu)}(R_a)^*=\begin{pmatrix}\nu\\m\\\varkappa\end{pmatrix}\mathscr{D}_{m\varkappa}^{(\nu)}(R_a)^*, \tag{3-213}$$

这里 $\bar{C}(s)'$ 是内禀群 $\bar{G}$ 的子群链 $\bar{G}(s)'$ 的 CSCO.

8. 组态空间正则表示的分解

以上讨论都是在群空间进行的. 我们也可在组态空间进行正则表示的分解. 这种分解和群空间的情形完全类似, 只要把以上的 $R_a \to \varphi_a(X)$, $\mathring{P}_m^{(\nu)k} \to \psi_m^{(\nu)k}$, 所有公式都仍成立. 例如

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)k} = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} \psi_m^{(\nu)k}, \tag{3-214}$$

$$\psi_m^{(\nu)k} = \sum_{a=1}^{g} u_{\nu mk, a} \varphi_a(X) = \sqrt{\frac{h_\nu}{g}} \sum_{a=1}^{g} D_{mk}^{(\nu)*}(R_a) \varphi_a(X). \tag{3-215}$$

$$R\psi_m^{(\nu)k} = \sum_{m'} D_{m'm}^{(\nu)}(R) \psi_{m'}^{(\nu)k}, \tag{3-216a}$$

$$\bar{R}\psi_m^{(\nu)k} = \sum_{k'} D_{kk'}^{(\nu)}(R) \psi_m^{(\nu)k'}. \tag{3-216b}$$

$$\langle \psi_m^{(\nu)k} | \psi_{m'}^{(\nu')k'} \rangle = \delta_{\nu\nu'} \delta_{mm'} \delta_{kk'},$$
$$\sum_{\nu mk} |\psi_m^{(\nu)k}\rangle\langle\psi_m^{(\nu)k}| = 1. \tag{3-217}$$

唯一需要注意的是当 g 个 $\{\varphi_a\}$ 互相不正交时(如第八章点群就要碰到这种情形), 要按第二章附录来处理.

为了进一步把变换关系(3-216)式搞清楚, 我们把属于不可约表示 (ν) 的 h_ν^2 个波函数 $\psi_m^{(\nu)k}$ 排成一个方阵 $\Psi^{(\nu)}$

$$\Psi^{(\nu)} = \begin{pmatrix} \psi_1^{(\nu)1} & \psi_1^{(\nu)2} & \cdots & \psi_1^{(\nu)h_\nu} \\ \psi_2^{(\nu)1} & \psi_2^{(\nu)2} & \cdots & \psi_2^{(\nu)h_\nu} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_{h_\nu}^{(\nu)1} & \psi_{h_\nu}^{(\nu)2} & \cdots & \psi_{h_\nu}^{(\nu)h_\nu} \end{pmatrix} \tag{3-218}$$

(3-216)式告诉我们, 在群 $G(\bar{G})$ 作用下, 矩阵(3-218)式的每一列(行)都按不可约表示 $D^{(\nu)}(\bar{D}^{(\nu)})$ 变换, 内禀(外部)量子数 $k(m)$ 不同的 IR 基 $\psi_m^{(\nu)k}$ 在群 $G(\bar{G})$ 作用下的变换性质完全相同.

9. 几种术语的含义

下面说明一下我们常用的几种提法的差别.

(a) $\psi^{(\nu)}$ 属于群 G 的 $IR\ (\nu)$ 是指: $\psi^{(\nu)}$ 为(3-218)式 h_ν^2 个波函数中的任一个, 或它们的线性组合. 因此若有两个波函数 $\psi_1^{(\nu)}$, $\psi_2^{(\nu)}$ 都属于 $IR(\nu)$, 并不意味着它们一定构成同一个 $IR(\nu)$ 的某两个分量. 例如 $\psi_1^{(\nu)}$ 可能属于群 G 第 k 个 $IR(\nu)$ (即属于不可约空间 $L_{(\nu)k}$), 而 $\psi_2^{(\nu)}$ 属于群 G 第 k' 个 $IR(\nu)$ (即属于 $L_{(\nu)k'}$), 它们不属于同一个不可约空间, 即在群 G 作用下, $\psi_1^{(\nu)}$ 根本不可能变到 $\psi_2^{(\nu)}$.

(b) $\varphi_m^{(\nu)}$ 属于群 G 的 $IR(\nu)$ 和 $G(s)$ 的 $IR(m)$ 指的是

$$\varphi_m^{(\nu)} = \sum_k b_k^m \psi_m^{(\nu)k}, \tag{3-219}$$

b_k^m 不一定等于 $b_k^{m'}$. 若 $b_k^m \neq b_k^{m'}$ 当 $m \neq m'$, 则 h_ν 个这样的波函数 $\varphi_1^{(\nu)} \cdots \varphi_{h_\nu}^{(\nu)}$ 并不构成一个不可约空间, 即 $R\varphi_m^{(\nu)} \neq \sum_{m'} D_{m'm}^{\nu}(R) \psi_{m'}^{(\nu)}$.

(c) $\psi_m^{(\nu)}$ $(m=1, 2, \cdots, h_\nu)$ 为 $G \supset G(s)$ 不可约基 (νm) 指的是 $\psi_1^{(\nu)} \cdots \psi_{h_\nu}^{(\nu)}$ 为 (3-218) 式矩

阵的某一列，或其 h_ν 列的某一线性组合

$$\psi^{(\nu)}_m=\sum_{k=1}^{h_\nu}a_k\psi^{(\nu)k}_m,\quad m=1,\ 2,\ \cdots,\ h_\nu. \tag{3-220a}$$

在群 G 作用下一定满足变换关系

$$R\psi^{(\nu)}_m=\sum_{m'}D^{(\nu)}_{m'm}(R)\psi^{(\nu)}_{m'}. \tag{3-220b}$$

10. 例子 S_3 群

§3.6 我们已在由乘积波函数构成的正则表示空间中求得了 S_3 群 CSCO-III 的本征函数(3-119). 对不可约基 $\psi^{(\nu)k}_m$ 提出因子 $\sqrt{h_\nu/g}$ 后，我们把(3-119)式列成下表.

表 3.9 S_3 和 $\bar{S}_3$ 群的标准基 $\psi^{(\nu)k}_m(\mathring{P}^{(\nu)k}_m)$ 和标准矩阵元

$[D^{(\nu)}_{mk}(R_a)]$ \ Φ_a \ R_a $\lambda_3, \lambda_2, \bar{\lambda}_2$ ν, m, k	Y_m W_k	归一系数 $\sqrt{\frac{h_\nu}{6}}$	$\|\alpha\beta\gamma\rangle$ e	$\|\beta\alpha\gamma\rangle$ (12)	$\|\gamma\beta\alpha\rangle$ (13)	$\|\alpha\gamma\beta\rangle$ (23)	$\|\gamma\alpha\beta\rangle$ (123)	$\|\beta\gamma\alpha\rangle$ (132)	不可约矩阵[1] $D^{(\nu)}_{ij}(R_a)$
3, 1, 1	[1 2 3] [α β γ]	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	1	1	1	1	1	1	$D^{(3)*}_{11}$
−3, −1, −1	[1/2/3] [α/β/γ]	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	1	−1	−1	−1	1	1	$D^{(-3)*}_{11}$
0, 1, 1	[1 2/3] [α β/γ]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	1	1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$D^{(0)*}_{11}$
0, −1, 1	[1 3/2] [α β/γ]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$D^{(0)*}_{21}$
0, 1, −1	[1 2/3] [α γ/β]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	0	0	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2}$	$D^{(0)*}_{12}$
0, −1, −1	[1 3/2] [α γ/β]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	1	−1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$D^{(0)*}_{22}$

我们来看一下位相选取问题. (3-119a) 式中，$\psi^{(0)1}_1$ 和 $\psi^{(0)-1}_{-1}$ 的位相由上述规则 (a) 决定. $\psi^{(0)1}_{-1}$ 的位相可任意选取，假定就选成(3-119a)那样. $\psi^{(0)-1}_1$ 的位相由上述规则(c)决定. 如选 $R_a=(13)$，由(3-119a)可以算出

$$D^{(0)}_{1-1}(13)=\langle\psi^{(0)1}_1|(13)|\psi^{(0)1}_{-1}\rangle=-1/2. \tag{3-221a}$$

因此 $\psi^{(0)-1}_1(\mathring{P}^{(0)-1}_1)$ 中 $\varphi_a=\varphi_3(R_a=(13))$ 前的系数必须为负. 由此看到 (3-119) 式或表 3.9 中的位相选择是理想的选择，于是可由(3-200)求 IR 矩阵元，或者直接从表 3.9 中读出所有的 IR 矩阵元.

---

1) 这里 $i, j=1, 2$ 为 IR 基编号，"1" 对应于 [1 2/3] 或 ，"2"对应于 [1 3/2] 或 [α γ/β].

表 3.9 是这样设计的，从该表可读出

(1) 归一化的 $S_3 \supset S_2$ 和 $\bar{S}_3 \supset \bar{S}_2$ 不可约基，如

$$\psi_{-1}^{(0)1} = \left| \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \cline{1-1}\end{array} \quad \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \beta \\ \hline \gamma \\ \cline{1-1}\end{array} \right\rangle = \frac{1}{2}(-|\gamma\beta\alpha\rangle + |\alpha\gamma\beta\rangle - |\gamma\alpha\beta\rangle + |\beta\gamma\alpha\rangle).$$

(2) 归一化的本征算符

$$\mathring{P}_{-1}^{(0)1} = \frac{1}{2}[-(13) + (23) - (123) + (132)]$$

(3) 将表纵读，可以得到可约基用不可约基展开，如

$$|\beta\alpha\gamma\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}\,(\psi_1^{(3)1} - \psi_{-1}^{(-3)-1}) + \sqrt{\frac{1}{3}}(\psi_1^{(0)1} - \psi_{-1}^{(0)-1})$$

(4) 不可约表示矩阵 $D^{(\nu)}(R)$，如

$$D^{(0)}(12) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad D^{(0)}(13) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \tag{3-221b}$$

和(3-91)式结果一致.

如果将表 3.9 中第五行全部反号而其余不动，即令

$$\mathring{P}_1^{(0)-1} = \sqrt{\frac{1}{3}}\left[\frac{\sqrt{3}}{2}(13) - \frac{\sqrt{3}}{2}(23) - \frac{\sqrt{3}}{2}(123) + \frac{\sqrt{3}}{2}(132)\right],$$

这时我们就不能从表 3.9 中直接读出 IR 矩阵元. 否则会得到以下错误结果：

$$D'(13) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

上式的错误是显然的，因为$(13)^2 = e$，所以 $D(13)$必须为厄米矩阵，而 $D'(13)$却不是厄米矩阵.

在后一位相选择下，我们只好根据(3-188c)来求矩阵元，例如可求出

$$D^{(0)1}(13) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \quad D^{(0)-1}(13) = \begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

现在 $D^{(0)1}$ 和 $D^{(0)-1}$ 不再相同，它们差一个相似变换

$$D^{(0)1}(R) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} D^{(0)-1}(R) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

由上一例子看到，在一些简单情形下，用目察法就可得到理想的位相. 如这里要求 $D(13)$为对称矩阵，就可知道 $P_{-1}^{(0)1}$ 和 $P_1^{(0)-1}$ 中，置换算符(13)前的系数必须是同号.

注意，由于我们取的是 $S_3 \supset S_2$ 不可约基，从上式看到，子群 S_2 的元素(12)的表示矩阵是对角化的，和(3-210)式的结论一致. 换言之，S_3 群的 $\nu = 0$ 不可约表示对 S_2 群来说是可约的，可以约成 $m = 1$ 和 $m = -1$ 两个一维表示，更多的例子见 §4.4 中的表.

习　　题

1. 由表 3.9 找出 S_3 群的所有不可约矩阵.
2. 利用 S_3 群作为例子，检验(3-216)式.
3. 以下 8 个矩阵构成一个矩阵群

$$(1,\ -1,\ i\sigma_x,\ -i\sigma_x,\ i\sigma_y,\ -i\sigma_y,\ i\sigma_z,\ -i\sigma_z)$$

1 为单位矩阵，$\sigma_{x,y,z}$ 为泡里矩阵：

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

将这个群的正则表示分解. 求出不可约特征标和不可约矩阵,并由此例说明抽象群,矩阵群,不可约矩阵三者之间的关系. 验证§3.8最后一段中的断言.

(注意: 类算符 $C_x=i\sigma_x+(-i\sigma_x)\neq 0$, 你能解释它为什么不等于零吗?)

4. 将 $\mathscr{C}_{4v}$ 群的正则表示进行分解, 求出不可约基和不可约矩阵元,并验证§3.8最后一段中的断言.

§3.10 广义投影算符

1. $P_m^{(\nu)k}$ 的性质

令

$$P_m^{(\nu)k}=\sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\ \mathring{P}_m^{(\nu)k}=\frac{h_\nu}{g}\sum_a D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)R_a. \tag{3-222}$$

由(3-182)式得

$$P_m^{(\nu)i}P_j^{(\mu)k}=\delta_{\nu\mu}\delta_{ij}P_m^{(\nu)k}. \tag{3-223}$$

利用 $R_a^\dagger=R_a^{-1}$ 以及 $D^{(\nu)}$ 的幺正性,将(3-222)式取厄米共轭得

$$(P_m^{(\nu)k})^\dagger=\frac{h_\nu}{g}\sum_a D_{mk}^{(\nu)}(R_a)R_a^\dagger=\frac{h_\nu}{g}\sum_a D_{mk}^{(\nu)}(R_a^{-1})R_a$$

$$=\frac{h_\nu}{g}\sum_a D_{km}^{(\nu)*}(R_a)R_a=P_k^{(\nu)m}. \tag{3-224}$$

通常称 $P_m^{(\nu)k}$ 为广义投影算符,置换群文献[Rutherford]中则称为母单位[35,94].

由(3-151)和(3-199)式可知将本征算符 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 作用在内禀态 $\Phi_0(X)$ 上,就得到 $G\supset G(s)$ 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)IR$ 基

$$\psi_m^{(\nu)k}(X)=\mathring{P}_m^{(\nu)k}\Phi_0(X). \tag{3-225}$$

因此我们称 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 为 $G\supset G(s)$ 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)IR$ 基投影算符.

注意在组态空间中,只有定义了内禀态后,内禀群元的作用才有定义,因而内禀量子数 k 才有意义. 把 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 作用于另一个态,如 $\varphi_a(X)=R_a\Phi_0(X)$ 时,得到另一个波函数,记为

$$\phi_m^{(\nu)k}(X)=\mathring{P}_m^{(\nu)k}\varphi_a(X). \tag{3-226a}$$

它仍然是 $G\supset G(s)$IR 基(νm), 但不再是以 $\Phi_0(X)$ 为内禀态的 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$IR 基$(\nu k)$. 由(3-225)和(3-199$b$)式,可将(3-226$a$)式写成

$$\phi_m^{(\nu)k}(X)=\sum_{k'}D_{kk'}^{(\nu)}(R_a)\psi_m^{(\nu)k'}. \tag{3-226b}$$

它是不同 k' (以 $\Phi_0(X)$ 为内禀态的内禀量子数)的 IR 基 $\psi_m^{(\nu)k'}$ 的线性组合.

§3.7已经讲过,内禀态的选取是任意的. 如果我们选 $\varphi_a(X)$ 作为新的内禀态 $\Phi_0'(X)$, 则 $\phi_m^{(\nu)k}(X)$ 为 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$IR 基$(\nu k)$. 换言之,(3-226$a$)式中 k 是以 $\Phi_0'(X)=\varphi_a(X)$ 为内禀态的内禀量子数. 由此清楚地表明,组态空间内禀量子数的意义取决于内禀态的定义.

现在我们来求出(3-154)式引进的三种表象间的变换关系,利用

$$\Phi_0(U)=(132)\Phi_0(I),\quad \Phi_0(V)=(123)\Phi_0(I),$$

令(3-226b)式中的 $R_a=(132)$和(123)就得到 U 旋、V 旋表象的波函数和 I 旋表象波函数之间的关系

$$\psi_m^{(\nu)k}(U)=\sum_{k'}D_{kk'}^{(\nu)}(132)\psi_m^{(\nu)k'}(I),\quad \psi_m^{(\nu)k}(V)=\sum_{k'}D_{kk'}^{(\nu)}(123)\psi_m^{(\nu)k'}(I). \tag{3-226c}$$

基本粒子层子模型中更复杂的表象变换关系见文献[11].

利用(3-222), (3-223)和(3-225)式, 可以证明

$$P_l^{(\nu)m'}\psi_m^{(\nu)k}=\sqrt{\frac{g}{h_\nu}}\,P_l^{(\nu)m'}P_m^{(\nu)k}\Phi_0=\delta_{mm'}\psi_l^{(\nu)k}. \tag{3-227}$$

上式表明, 当 $m\neq m'$ 时 $P_l^{(\nu)m'}$ 作用在 IR 基 $\psi_m^{(\nu)k}$ 上时结果为零, 当 $m'=m$ 时, $P_l^{(\nu)m}$ 把 $\psi_m^{(\nu)k}\to\psi_l^{(\nu)k}$, 即将不可约空间 $L_{(\nu)k}$ 中第 m 个分量 IR 基变到第 l 个分量 IR 基. 文献[42]中将 $P_l^{(\nu)m}$ 记为 $P_{((\nu)m\to l)}$, 并称它为转移算符(Shift operator).

由(3-202b)式可得到(3-222)式的逆展开

$$R_a=\sum_{\nu=1}^{N}\sum_{m=1}^{h_\nu}\sum_{k=1}^{h_\nu}D_{mk}^{(\nu)}(R_a)P_m^{(\nu)k}. \tag{3-228}$$

令 R_a 为幺元素, 得到幺元素的分解

$$e=\sum_{\nu=1}^{N}\sum_{m=1}^{h_\nu}P_m^{(\nu)m}. \tag{3-229}$$

由(3-224)和(3-223)式得

$$(P_m^{(\nu)m})^\dagger=P_m^{(\nu)m}, \tag{3-230}$$

$$P_m^{(\nu)m}P_l^{(\nu)l}=\delta_{ml}P_m^{(\nu)m}. \tag{3-231}$$

由此可知, $P_m^{(\nu)m}$ 为自轭、等幂算符. $P_m^{(\nu)m}$ 是一个投影算符, 将它作用在内禀态 Φ_0 上, 投影出第 m 套 ν 不可约基的第 m 个分量 $\psi_m^{(\nu)m}=P_m^{(\nu)m}\Phi_0$.

文献(Hamermesh, Bohr(1969))上将 $P_m^{(\nu)m}$ 记为 $P_{((\nu)m)}$ 和 $P_m^{(\nu)}$, 这两种表示方法不太好, 容易使人产生误解, 以为 $P_1^{(\nu)}$, $P_2^{(\nu)}$, …, $P_{h_\nu}^{(\nu)}$ 构成同一套 $IR(\nu)$ 的 h_ν 个分量. 由(3-188a)可知, $P_m^{(\nu)m}$ 是群 G 第 m 套 $IR(\nu)$ 的第 m 个分量, $P_1^{(\nu)1}$, $P_2^{(\nu)2}$, …, $P_{h_\nu}^{(\nu)h_\nu}$ 根本不属于同一个 $IR(\nu)$. Bohr 书中对于该书中(10-10)式的解释就是这种误解的例子. 在组态空间中一般说来, $P_1^{(\nu)1}\Phi(X)$, $P_2^{(\nu)2}\Phi(X)$, …, $P_{h_\nu}^{(\nu)h_\nu}\Phi(X)$ 也不是同一 $IR(\nu)$ 的 h_ν 个分量, 除非由函数集 $\{R_a\Phi(X)\}$, $a=1, 2, \cdots, g$ 构成的可约表示中, 该 $IR(\nu)$ 只出现一次.

由(3-199a)式得

$$R_aP_k^{(\nu)k}=\sum_{k'}D_{k'k}^{(\nu)}(R_a)P_{k'}^{(\nu)k}. \tag{3-232}$$

由此可知 $\{R_aP_k^{(\nu)k}\}$ 属于群 G 第 k 个 (ν) 不可约空间 $L_{(\nu)k}$, $P_k^{(\nu)k}$ 是 $L_{(\nu)k}$ 的生成元. (3-229)式等价于将群空间 L_g 分解成群 G 不可约空间的直和 $L_g=\sum_{\nu k}\oplus L_{(\nu)k}$. 类似地可知 $\{P_m^{(\nu)m}R_a\}$ 属于群 $\overline{G}$ 不可约空间 $\overline{L}_{(\nu)m}$, 所以 $P_m^{(\nu)m}$ 又是 $\overline{L}_{(\nu)m}$ 的生成元, (3-229)式又对应于 $L_g=\sum_{\nu m}\oplus\overline{L}_{(\nu)m}$.

再定义

$$P^{(\nu)}=\sum_{k=1}^{h_\nu}P_k^{(\nu)k}. \tag{3-233}$$

由(3-231)式可证

$$P^{(\nu)}P^{(\mu)}=\delta_{\nu\mu}P^{(\nu)}. \tag{3-234}$$

传统群表示论书上称 $P^{(\nu)}$ 为等幂元, $P_k^{(\nu)k}$ 为素等幂元(primitive idempotent). $P^{(\nu)}$ 为群 CSCO-I 的本征空间 L_ν 的生成元, $P_k^{(\nu)k}$ 为群 G 不可约空间 $L_{(\nu)k}$ 的生成元. (3-233)式对应于本征空间 L_ν 的进一步分解 $L_\nu=\sum_{k=1}^{h_\nu}\oplus L_{(\nu)k}$.

由(2-90)式和(3-222)式知

$$P^{(\nu)}=\frac{h_\nu}{g}\sum_{i=1}^{N}\chi_i^{(\nu)*}C_i. \tag{3-235a}$$

显然 $P^{(\nu)}$ 是 CSCO-I 的本征算符，对应的本征值为 ν，而(3-234)式就是(3-52)式. 因此在群空间求得 CSCO-III 的本征算符 $P_k^{(\nu)k}$ 再行收缩得到的 $P^{(\nu)}$((3-233)式)，就是在类空间求的 CSCO-I 的本征算符 $P^{(\nu)}=Q^{(\nu)}/\eta_\nu$，将(3-235a)式与(3-27b)及(3-51)式比较得

$$\frac{h_\nu}{g}\chi_i^{(\nu)*}=\frac{1}{\eta_\nu}q_i^{(\nu)}. \tag{3-236}$$

令(3-202a)式中的 $m=k$, $m'=k'$，两边对 m 和 m' 求和得到

$$\sum_{i=1}^{N}\frac{g_i}{g}\chi_i^{(\nu)*}\chi_i^{(\nu')}=\delta_{\nu\nu'}. \tag{3-237a}$$

把 $\sqrt{\frac{g_i}{g}}\chi_i^{(\nu)}(i=1,2,\cdots,N,\ \nu=1,2,\cdots,N)$ 当作 $N\times N$ 矩阵的矩阵元，则(3-237a)式表示此矩阵的任意两行互相正交，由线性代数的一般理论[23]立即可知，该矩阵任意两列也正交，即有

$$\sum_{\nu=1}^{N}\frac{g_i}{g}\chi_i^{(\nu)*}\chi_j^{(\nu)}=\delta_{ij}. \tag{3-237b}$$

(3-237a, b)就是特征标的两个正交定理. (3-237*a*)或(3-237*b*)可作为一个表示的不可约性的判据. 利用(3-237b)式可将(3-235a)式反展开

$$C_i=\sum_{\nu=1}^{N}\frac{g_i}{h_\nu}\chi_i^{(\nu)}P^{(\nu)}. \tag{3-235b}$$

由于不可约特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 构成一个正交向量系. 两个不等价的不可约表示不可能具有相同的特征标，而具有相同特征标的两个不可约表示必定不等价. 由§2.8我们又知道，等价表示必具有相同的特征标. 因此两个不可约表示等价的充要条件是它们具有相同的特征标.

根据(3-69)式，不可约特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 是群 G 的 CSCO 的本征值 $\lambda^{(\nu)}$ 的函数. 因此两个不可约表示等价的充要条件是它们有相同的本征值 $\lambda^{(\nu)}$.

§3.3中证明了，在任意表示空间中，群 G 的 CSCO 的本征值至多只有在类空间定出的那 N 种. 综合前述两点，我们有

定理7 群 G 的任一个不可约表示必等价于群 G 正则表示分解所得的某一个不可约表示.

因此群 G 的正则表示在等价意义上包含了群 G 所有的不可约表示. 于是我们得到一个极其重要的定理:

定理8 一个包含 N 个类的群 G 有也只有 N 个不等价的不可约表示.

2. 构造广义投影算符的 $P_m^{(\nu)k}$ 的递推方法[28]

(3-169*a*)式给出计算广义投影算符 $P_m^{(\nu)k}$ 的本征函数方法. 如果已知群 G 及其正则链 $G(s)$ 中所有子群的不可约特征标，则也可以不必解本征方程而得到 $P_m^{(\nu)k}$.

若 $G(s)=G(1)\supset G(2)\supset G(3)\supset\cdots$，它们的 IR 分别为 ν_1, ν_2, ν_3, $\cdots$. 容易证明，不计归一因子有

$$P_m^{(\nu)m}=P^{(\nu)}P^{(\nu_1)}P^{(\nu_2)}\cdots,\quad m=(\nu_1,\ \nu_2,\ \nu_3\cdots). \tag{3-238}$$

$P^{(\nu)}(P^{(\nu_i)})$ 和群 $G(G_i)$ 的特征标的关系由(3-235a)式表示，它是群 $G(G_i)$ 的类算符的线性组合. 而 G 和 G_i 群的所有类算符都互相对易，因此 G_i 群的 CSCO-I $C(i)$ 和(3-233)式中任一

因子 $P^{(\nu)}$, $P^{(\nu)}$ 都对易,于是有

$$\begin{aligned} &CP_m^{(\nu)m}=\nu P_m^{(\nu)m},\\ &C(i)P_m^{(\nu)m}=P^{(\nu)}P^{(\nu_1)}\cdots(C(i)P^{(\nu_i)})\cdots=\nu_i P_m^{(\nu)m},\\ &\bar{C}(i)P_m^{(\nu)m}=P_m^{(\nu)m}C(i)=\nu_i P_m^{(\nu)m}. \end{aligned} \tag{3-239}$$

(3-239)式即为(3-169a)式. 证毕.

令 $P_{m_1}^{(\nu_1)m_1}$ 为 $G_1\supset G_2\supset G_3\supset\cdots$ 分类基的广义投影算符,

$$P^{(m)}\equiv P_{m_1}^{(\nu_1)m_1}=P^{(\nu_1)}P^{(\nu_2)}P^{(\nu_3)}\cdots,\ m=(\nu_1,\ \nu_2,\ \nu_3,\ \cdots),\ m_1=(\nu_2,\ \nu_3,\ \cdots). \tag{3-240a}$$

由(3-238)式和(3-240a)式得

$$P_m^{(\nu)m}=P^{(\nu)}P^{(m)}=P^{(\nu)}P_{m_1}^{(\nu_1)m_1}. \tag{3-240b}$$

(3-240b)式表明群 G 的等幂算符 $P_m^{(\nu)m}$ 可表示为 G 的投影算符 $P^{(\nu)}$ 和其子群 G_1 的等幂算符 $P_{m_1}^{(\nu_1)m_1}$ 的乘积,因此可用递推法计算 $P_m^{(\nu)m}$.

类似地可以证明,若略去常数因子,我们有

$$P_m^{(\nu)k}=P^{(\nu)}P^{(m)}RP^{(k)}, \tag{3-241}$$

$$P^{(k)}=P^{(\bar{\nu}_1)}P^{(\bar{\nu}_2)}P^{(\bar{\nu}_3)}\cdots,\quad k=(\bar{\nu}_1,\ \bar{\nu}_2,\ \bar{\nu}_3,\ \cdots).$$

(3-241)式中 R 为群 G 中某一合适元素, R 可以任意选取,只需使 $P^{(m)}RP^{(k)}\neq 0$ (显然 R 不能是和 $C(s)$ 对易的元素).

例. S_3 群.

由(3-44)式可得到 S_3 和 S_2 群的投影算符为(不计归一因子,下同)

$$P^{(\nu)}=P^{(0)}=(2e-(123)-(132)),$$

$$P^{(m)}=P^{(\pm 1)}=(e\pm(12))$$

于是

$$P_1^{(0)1}=P^{(0)}P^{(1)}=[2(e+(12))-(13)-(23)-(123)-(132)], \tag{3-242}$$

$$\begin{aligned} P_{-1}^{(0)1}&=P^{(0)}P^{(-1)}(23)P^{(1)}\\ &=[2e-(123)-(132)][e-(12)](23)[e+(12)]\\ &=3[-(13)+(23)-(123)+(132)], \end{aligned}$$

和表 3.9 一致. 由上例看到, 对于求 $m\neq k$ 时的 $P_m^{(\nu)k}$, 上述方法并不很方便. 但是知道了素等幂元 $P_m^{(\nu)m}$ 后,我们可用其它方法简单地求出 $P_m^{(\nu)k}$, 见(3-253)式.

习　　题

1. 求 S_4 群的素等幂元 $P_{3,1}^{(2),3,1}$、$P_{0,1}^{(2),0,1}$ 和 $P_{0,-1}^{(2),0,-1}$(利用 § 3.2习题 1 的结果).

§ 3.11　求特征标的本征函数法

传统群表示论中,特征标占有很重要的地位,但求特征标却没有一个统一的方法. 下面我们给出一个求有限群特征标的普适方法.

由(3-236)式、(3-54)式和(3-67)式得

$$|\eta_\nu|^2=\frac{g}{h_\nu^2}. \tag{3-243}$$

适当选择位相可使 η_ν 为正实数,于是

$$\eta_\nu=\sqrt{g}/h_\nu. \tag{3-244}$$

代回到(3-236)式就得到特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 和 $q_i^{(\nu)}$ 的关系

$$\chi_i^{(\nu)}=\sqrt{g}\,q_i^{(\nu)*}. \tag{3-245}$$

于是求特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 归结为在类空间求 CSCO-I 的共同本征矢量 $Q^{(\nu)}$.

如果把特征标 $\chi_i^{(\nu)}$ 看成一个类上函数 $\chi^{(\nu)}(C_i)$, 由(3-205)式可知, CSCO-I 在类上函数空间的本征函数就正比于特征标的复共轭,即

$$C\chi^{(\nu)*}(C_i)=\nu\chi^{(\nu)*}(C_i). \tag{3-246}$$

(以后会看到,上式对连续群也成立,并且意义更加清楚.)

本征函数法求特征标的方法归纳如下:

1) 找出构成完备算符集 $C=(C_{i_1}, C_{i_2}, \cdots)$ 的 l 个类算符的矩阵表示

$$\|C_{i_1j}^k\|_1^N,\ \|C_{i_2j}^k\|_1^N,\ \cdots.$$

2) 求出这 l 个矩阵的共同特征矢量,即解联立本征方程

$$\sum_j(C_{ij}^k-\lambda_i^{(\nu)}\delta_{jk})q_j^{(\nu)}=0,\quad i=i_1,\ i_2,\ \cdots \tag{3-247}$$

对应每一个本征值 $\lambda^{(\nu)}=(\lambda_{i_1}^{(\nu)}, \lambda_{i_2}^{(\nu)}, \cdots)$ 可由上式解出一个特征矢量 $\vec{q}^{(\nu)}$.

3) 从归一条件 $\sum_{i=1}^N g_i|q_i^{(\nu)}|^2=1$ 定出 $q_i^{(\nu)}$ 绝对大小, 从条件 $q_e^{(\nu)}$ 为正实数, (e 代表幺元素)定出 $q_i^{(\nu)}$ 的相因子(因为 $\chi_e^{(\nu)}=\sum_{m=1}^{h_\nu}D_{mm}^{(\nu)}(e)=h_\nu$ 恒为正整数).

4) 从 $\chi_i^{(\nu)}=\sqrt{g}\,q_i^{(\nu)*}$ 就可定出特征标.

例如我们可以方便地从(3-44a), (3-46), (3-49)和(3-245)式得到 S_3 群($g=6$)和 $\mathscr{C}_{6v}$ 群($g=12$)的特征标,它们分别列在表 3.11-1 和表 3.11-2 中.

表 3.11-1 S_3 群特征标

$\lambda^{(\nu)}$	类 / 配分	C_1 (1^3)	C_2 (12)	C_3 (3)
3	[3]	1	1	1
−3	[1³]	1	−1	1
0	[21]	2	0	−1

表 3.11-2 $\mathscr{C}_{6v}$ 群的特征标

$\lambda_2^{(\nu)}$	$\lambda_3^{(\nu)}$	类 / 老的标志	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6
2	3	A_1	1	1	1	1	1	1
2	−3	A_2	1	1	1	1	−1	−1
−2	3	B_1	1	−1	1	−1	1	−1
−2	−3	B_2	1	−1	1	−1	−1	1
−1	0	E_1	2	2	−1	−1	0	0
1	0	E_2	2	−2	−1	1	0	0

为了便于对照,表中也给出了不可约表示的老标志,其意义见第四章和第八章.

Jones 和 Boerner 也介绍过利用 C_{ij}^k 来决定特征标的方法. 他们的方法和本征函数法的根本区别在于他们没有引入完备算符集及其本征矢量的概念, 因此他们的方法需要知道

所有 N 个类算符的矩阵表示 $\|C_{ij}^k\|_1^N$, $i=1, 2, \cdots, N$, 而我们只要 l 个类算符的矩阵表示 $\|C_{ij}^k\|_1^N$, $i=i_1, i_2, \cdots, i_l$. 考虑到 $l\ll N$, 便可知我们的方法要简便得多. Jones 的方法除此外还有一个麻烦，由 N 个矩阵解出 N^2 个特征根 $\lambda_i^{(\nu)}$ 后，他还需利用特征标的正交性通过复杂的步骤将 N^2 个特征根 $\lambda_i^{(\nu)}$ 排成一个方阵，然后才能求出特征标. Boerner 方法同样也还遇到另一个困难，他要解这样一种 N 阶矩阵的"特征根"，该矩阵中含有 N 个不定乘子 U_1, U_2, $\cdots$, U_N, 对 $N\geqslant 4$ 就无一般方法可解了. 由于上述困难，此类方法只用于 N 数目不大的一些群，如点群和低阶置换群，而对于高阶置换群几乎根本不能用了，于是只好另找特殊的方法，例如 Frobenious 方法(见 Hamermesh 书). 我们由于引入了完备算符集，使特征标的计算大为简化，对点群、置换群、空间群或其它有限群都适用.

习　　题

1. 求出 S_4 群的特征标(利用 § 3.2 习题 1 的结果)。

§ 3.12　不可约特征标的用途

从前面的讨论看到，在本理论中，特征标退居次要地位，即使不知道一个群的不可约特征标 $\chi_i^{(\nu)}$, 也照样可以将群 G 的可约表示约化. 但是如果已经知道了一个群的不可约特征标(常用的有限群的不可约特征标都为已知，见 Hamermesh 书)则利用这现成的结果，可简化计算. 特征标在本理论中的主要作用有以下三点:

(1) 利用特征标找群 G 的 CSCO-I.

由群 G 的特征标 $\chi_i^{(\nu)}$, 利用 $\lambda_i^{(\nu)}=(g_i/h_\nu)\chi_i^{(\nu)}$ 立即可得出由类算符的本征值所构成的一个矩阵

$$\begin{pmatrix} \lambda_1^{(\nu_1)} & \lambda_2^{(\nu_1)} & \cdots & \lambda_N^{(\nu_1)} \\ \lambda_1^{(\nu_2)} & \lambda_2^{(\nu_2)} & \cdots & \lambda_N^{(\nu_2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \lambda_1^{(\nu_N)} & \lambda_2^{(\nu_N)} & \cdots & \lambda_N^{(\nu_N)} \end{pmatrix} \tag{3-248}$$

如果该矩阵中有某一列，例如第 i_1 列的 N 个值 $\lambda_{i_1}^{(\nu_1)}$, $\lambda_{i_1}^{(\nu_2)}$, $\cdots$, $\lambda_{i_1}^{(\nu_N)}$ 全不相等，则类算符 C_{i_1} 即构成群 G 的 CSCO-I. 如果找不到 N 个值全不相同的列，则找两个列，如 i_1, i_2 列，使得 N 对值 $(\lambda_{i_1}^{(\nu_1)}, \lambda_{i_2}^{(\nu_1)})$, $\cdots$, $(\lambda_{i_1}^{(\nu_N)}, \lambda_{i_2}^{(\nu_N)})$ 全不相同，于是两个类算符 (C_{i_1}, C_{i_2}) 构成群 G 的 CSCO-I, 依此类推.

由此看到，若已知群 G 的不可约特征标，则马上可找到群 G 的 CSCO-I.

(2) 已知特征标，立刻可得到 CSCO-I 在类空间的本征算符，即等幂算符 $P^{(\nu)}=\dfrac{h_\nu}{g}\sum\limits_{i=1}^{N}\chi_i^{(\nu)*}C_i$. 已知群 G 及其正则子群链中每一子群的等幂算符，就可由(3-238)式求出素等幂算符 $P_m^{(\nu)m}$.

(3) 决定可约表示分解时某一不可约表示出现的次数.

在分解可约表示 D (2-103b)式时，我们引进了 $IR(\nu)$ 出现的次数 τ_ν,

$$D=\sum_\nu \oplus\tau_\nu D^{(\nu)}, \quad \chi_i=\sum_\nu \tau_\nu\chi_i^{(\nu)}, \tag{3-249}$$

χ_i 为可约表示 D 的特征标. 利用特征标正交定理(3-237)式，由上式立刻得到 τ_ν 的表达式.

$$\tau_\nu=\sum_i \frac{g_i}{g}\chi_i\chi_i^{(\nu)*}. \tag{3-250}$$

当我们只需要知道 D 能分解成那几种不可约表示及每个不可约表示出现几次但不要求知道约化系数时，由上式可立刻得到回答，而不需在可约表示空间解 CSCO-I 的本征方程.

例 求群 G 正则表示中维数为 h_ν 的 $IR(\nu)$ 出现的次数 τ_ν.

答案 $\tau_\nu=h_\nu$ 我们早已知道. 现用(3-250)式来验证一下. 由 § 2.6 可知，正则表示中只有幺元素的特征标不为零，等于群的阶 g，即

$$\chi_e=g;\quad \chi_i=0\quad 对\quad i\neq e$$

幺元素类中元素数 $g_e=1$. 将以上结果代入(3-250)并利用 $\chi_e^{(\nu)}=h_\nu$，得出 $\tau_\nu=h_\nu$.

(3-250)式告诉我们，如果两个表示具有相同的特征标，则在约化后这两者的表示矩阵具有相同的准对角形式(2-101)式. 因此除了 $D^{(\nu)}$ 出现的次序可能不同外，它们是相同的. 由于这两个表示可变换到等价的已约形式，这两个表示本身必互相等价. 此外由于等价表示具有相同的特征标，因此**两个表示为等价的充要条件是它们的特征标相等**.

§ 3.13 群 G 非正则表示的约化

1. 群 G 的 CSCO-II

前面已提到，若 $G\supset G(s)$ 为一正则链，则 $(C,\ C(s))$ 称为群 G 的 CSCO-II. 根据 § 3.8 我们知道，在群 G 的 ν 不可约空间，$(C,\ C(s))$ 有 h_ν 套不同的本征值 $(\nu,\ m)$，$m=m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_{h_\nu}$. 因此群 G 的 CSCO-II 为群 G 不可约空间的完备算符集，CSCO-II 的本征值唯一标志了群 G 的一个不可约基矢.

子群链 $G(s)$ 的选取以及 CSCO-II 的物理意义见 § 3.18. 以后我们用得较多的也是 CSCO-II.

具体应用时，对一个群的不同表示(ν)，子群链 $G(s)$ 还可以有不同的选取，因而有不同的 CSCO-II. 详细例子见第八章点群. $G(s)$ 的不同选取对应于各种等价表示.

2. 正则子群链，$\tau_\nu=1$ 的情形

在 § 3.9 建立普遍的理论时，我们讨论了正则表示的分解. 然而实际上碰到的往往不是正则表示的情形. 设组态空间有 $\mathscr{N}$ 个正交归一的波函数

$$\varphi_a(X),\ a=1,\ 2,\ \cdots,\ \mathscr{N}$$

它们荷载群 G 的一个可约表示. 我们要求 $G\supset G(s)$ 不可约基，$G\supset G(s)$ 为一正则子群链.

首先在 $\{\varphi_a\}$ 表象中解 CSCO-I 的本征方程，如果本征值 ν 是下面方程

$$\det\|\langle\varphi_a|C|\varphi_b\rangle-\nu\delta_{ab}\|=0 \tag{3-251}$$

的 h_ν 重根，则表明不可约表示(ν)只出现一次，$\tau_\nu=1$. 于是解 CSCO-II 的本征方程就可得到 $G\supset G(s)$ 不可约基 $\psi_m^{(\nu)}$.

$$\psi_m^{(\nu)}=\sum_a u_{\nu m,a}\varphi_a,$$

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}=\begin{pmatrix}\nu\\ m\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}, \tag{3-252}$$

$$\sum_{b=1}^{N}\left[\left\langle\varphi_a\left|\begin{array}{c}C\\C(s)\end{array}\right|\varphi_b\right\rangle-\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\delta_{ab}\right]u_{\nu m,b}=0.$$

对应一个(ν, m)值，(3-252)式可得到唯一的一个解(除位相外)。

我们还可利用以下事实简化求不可约基的计算：若已求得不可约表示ν的某一分量如$\psi^{(\nu)}_{m_1}$，则有两种方法可以求得$IR(\nu)$的其余分量：① 用广义投影算符(3-222)式作用于此$\psi^{(\nu)}_{m_1}$上。② 用有限群的少数几个生成元R_G(生成元的定义为由这些R_G的任意次序和任意幂次的乘积可给出整个群G)对$\psi^{(\nu)}_{m_1}$作用就可导出其余分量

$$\psi^{(\nu)}_{m}=F^{(\nu)}_{mm_1}(R_G)\psi^{(\nu)}_{m_1}. \qquad (3\text{-}253)$$

关于算符$F^{(\nu)}_{mm_1}(R_G)$的具体形式因群而异，置换群例子见(4-36a)式，点群例子见(8-41)和(8-42)式。显然第二种方法要方便得多。

3．内禀态(非正则表示情形)

当可约表示中包含不可约表示(ν)的次数大于1而小于h_ν的时候，我们仍希望用内禀量子数来区分这τ_ν个$IR(\nu)$。但是内禀量子数k在L_ν空间有h_ν个不同的本征值，而现在只有$\tau_\nu<h_\nu$个$IR(\nu)$，因此量子数k过剩。本节任务就是如何在量子数集$k=(\bar{\lambda}(s_1), \bar{\lambda}(s_2), \cdots)$(见(3-168)式)中剔除虚假量子数，使剩下的真实量子数κ具有τ_ν种不同的本征值。

假定内禀态$\Phi_0(X)$具有某种对称性，它在某些群元T_α作用下不变：

$$T_\alpha\Phi_0(X)=\Phi_0(X), \quad \alpha=1, 2, \cdots, m. \qquad (3\text{-}254)$$

保持$\Phi_0(X)$不变的所有操作$\{T_\alpha\}$构成一个阶数为m的群G_m，称为内禀态的对称群，它是群G的子群。这时$\Phi_0(X)$经群G的g个元素作用后，只能得到$n=(g/m)<g$个线性独立基矢$\varphi_a(X)$，m个群元$R_aT_1\cdots R_aT_m$作用在内禀态Φ_0上得到同一个基矢

$$\varphi_a(X)=R_a\Phi_0(X)=R_aT_\alpha\Phi_0(X), \qquad (3\text{-}255)$$
$$a=1, 2, \cdots, n, \ \alpha=1, 2, \cdots, m.$$

容易看出，在这种非正则表示的情形，除了和T_α相对应的内禀群元$\bar{T}_\alpha$外(这时$\bar{T}_\alpha$全等价于幺元素)，其余内禀群元都没有确定作用，它对任一个波函数的作用结果不唯一。例如作用在内禀态上

$$\bar{R}\Phi_0(X)=R\Phi_0(X),$$
$$\bar{R}\Phi_0(X)=\bar{R}T_\alpha\Phi_0(X)=T_\alpha R\Phi_0(X), \qquad (3\text{-}256)$$

$R\Phi_0(X)\neq T_\alpha R\Phi_0(X)$。因此内禀群元$\bar{R}$作用在$\Phi_0(X)$上结果不唯一。

例如内禀置换群$\bar{S}_4$，内禀态$\Phi_0=|\alpha\beta\beta\gamma\rangle$，保持$\Phi_0$不变的操作是$T_\alpha=e, (23)$。

$$(\overline{12})\Phi_0=(12)\Phi_0=(12)|\alpha\beta\beta\gamma\rangle=|\beta\alpha\beta\gamma\rangle,$$
$$(\overline{12})\Phi_0=(\overline{12})(23)\Phi_0=(23)(12)\Phi_0=|\beta\beta\alpha\gamma\rangle,$$

二者不等。

下面将证明，在非正则表示组态空间，虽然单个内禀群元已失去意义，但内禀群$\bar{G}$的某些子群的类算符具有确定意义，这些类算符有确定意义的子群是由内禀态所决定的。若群G的某一子群G_1的类算符$C_i(1)$和所有的T_α对易：

$$[C_i(1), T_\alpha]=0, \quad \alpha=1, 2, \cdots, m \qquad (3\text{-}257)$$

则$\bar{G}$的子群$\bar{G}_1$的类算符$\bar{C}_i(1)$有确定作用。证明如下：

$$\bar{C}_i(1)\Phi_0(X)=\bar{C}_i(1)R_a\Phi_0(X)=R_aC_i(1)\Phi_0(X). \qquad (3\text{-}258)$$

$$\bar{C}_i(1)\Phi_a(X)=\bar{C}_i(1)R_aT_a\Phi_0(X)=R_aT_aC_i(1)\Phi_0(X)$$
$$=R_aC_i(1)T_a\Phi(X)=R_aC_i(1)\Phi_0(X). \quad (3\text{-}259)$$

因此在非正则表示的情形，可以这样来找有确定意义的内禀算符集 $\bar{C}(s')$：

(a) 给定内禀态 $\Phi_0(X)$，找出它的对称群 G_{in}.

(b) 找出这样一种子群链 $G(s')$，该 $G(s')$ 中各子群的 CSCO-I 和内禀态对称群 G_{in} 对易，这些 CSCO-I 的集合记为 $C(s')$.

(c) 和算符集 $C(s')$ 相对应的内禀算符集 $\bar{C}(s')$ 有确定意义，它所提供的附加量子数正好可用来区分非正则表示情况下出现不止一次的 IR 基.

注意子群链 $G(s')$ 不再是正则子群链 $G(s)$. 例如对于 S_4 群的内禀态 $|\alpha\beta\beta\gamma\rangle$ 来说，$\bar{S}_4$ 的子群 $\bar{S}_3$ 的 CSCO $\bar{C}(3)=\overline{(12)}+\overline{(23)}+\overline{(13)}$ 有确定意义，现在 $\bar{C}(s')=\bar{C}(3)$. 而在 S_4 群的正则子群链为 $G(s)=S(3)\supset S(2)$，对应的 $\bar{C}(s)=(\bar{C}(3),\ \bar{C}(2))$. 显见 $\bar{C}(s')$ 中算符的数目少了，因为现在 $\bar{C}(2)$ 没有确定意义. 进一步的讨论见 § 4.8.

当内禀群 $\bar{G}$ 的单个群元没有确定作用时，前面的关于不可约表示的定义——即在群 $\bar{G}$ 作用下的最小不变子空间已失去意义，因此原则上说，这时谈不上群 $\bar{G}$ 的什么可约，不可约表示. 但是内禀群 $\bar{G}$ 的 CSCO 及其某些子群 $\bar{G}(s')$ 的 CSCO 是有意义的(注意群 $\bar{G}$ 和 G 的 CSCO 相等)，$\bar{C}(s')$ 的本征值可用来区分一个可约表示中所包含的 $\tau_\nu(1<\tau_\nu<h_\nu)$ 个等价的 $IR(\nu)$. 因此为了叙述的方便，我们不妨将 $(\bar{C},\ \bar{C}(s'))$ 的共同本征函数仍称为 $\bar{G}\supset\bar{G}(s')$ 分类基.

4. 正则子群链, $\tau_\nu>1$ 的情形

如果本征值 ν 是(3-251)式的 $\tau_\nu h_\nu$ 重根，则表明不可约表示 ν 出现 τ_ν 次. 这时对给定 $(\nu,\ m)$，由(3-252)式可得出 τ_ν 个线性独立解. 解不能唯一定下来. 这时可采取以下两种办法求解.

(1) 利用内禀量子数区分 τ_ν 组解

从 $\{\varphi_a\}$ 中选定某一个态，例如 φ_1 作为内禀态 Φ_0, $\Phi_0=\varphi_1$. 根据上节讨论找出内禀子群链 $\bar{G}(s')$ 及内禀算符集 $\bar{C}(s')$. 解以下联立本征方程就可得到 $G\supset G(s)$ 和 $\bar{G}\supset\bar{G}(s')$ 不可约基 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$

$$\psi_m^{(\nu)\varkappa}=\sum_a u_{\nu m\varkappa,a}\varphi_a,$$

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s') \end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)\varkappa}=\begin{pmatrix} \nu \\ m \\ \varkappa \end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)\varkappa}. \quad (3\text{-}260)$$

$$\sum_{b=1}^{N}\left[\left\langle\varphi_a\left|\begin{matrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s')\end{matrix}\right|\varphi_b\right\rangle-\begin{pmatrix}\nu \\ m \\ \varkappa\end{pmatrix}\delta_{ab}\right]u_{\nu m\varkappa,b}=0,$$

$$m=m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_{h_\nu},\ \varkappa^{1)}=\varkappa_1,\ \varkappa_2,\ \cdots,\ \varkappa_{\tau_\nu},\ N=\sum_\nu\tau_\nu h_\nu$$

这时简并消除，对给定 $(\nu,\ m,\ \varkappa)$，由(3-260)式只能得到一个解 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$. 类似于前面的情形，也可从方程(3-260)式先求得某一分量 m 的 τ_ν 个解 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$, $\varkappa=\varkappa_1,\ \varkappa_2,\ \cdots,\ \varkappa_{\tau_\nu}$, 再利用

$$\psi_{m'}^{(\nu)\varkappa}=F_{m'm}^{(\nu)}(R_i)\psi_m^{(\nu)\varkappa},\ \varkappa=\varkappa_1,\ \cdots,\ \varkappa_{\tau_\nu} \quad (3\text{-}261)$$

1) 注意这里量子数 $\varkappa$ 和(3-168)式中量子数 k 的差别.

得到其余分量.

$\psi_m^{(\nu)\varkappa}$ 在群 G 作用下的变换性质为

$$R\psi_m^{(\nu)\varkappa}=\sum_{m'} D_{m'm}^{(\nu)}(R)\psi_{m'}^{(\nu)\varkappa}. \tag{3-262}$$

由于 $[R, \bar{C}(s')]=0$, R 不会改变内禀量子数 $\varkappa$. 但由于现在单个内禀群元对组态空间波函数无确定作用,因此类似于(3-216b)式的关系不再成立. $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$ 仅仅是 $\bar{C}(s')$ 的本征函数.

由(3-262)式看到, 内禀量子数 $\varkappa$ 可用来区分这些在群 G 作用下变换性质完全相同的不可约基,并且由于 $\varkappa$ 是 $\bar{C}(s')$ 的本征值, 所以 $\varkappa$ 不同的基仍然正交. 因此 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$ 满足正交归一性

$$\langle\psi_{m'}^{(\nu')\varkappa'}|\psi_m^{(\nu)\varkappa}\rangle=\delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{\varkappa\varkappa'}. \tag{3-263}$$

(2) 任意取 τ_ν 组正交解

对给定一个 (νm), 由(3-252)式可得到 τ_ν 组线性独立解,将其正交化得到 $\psi_m^{(\nu)j}$, $j=1, 2, \cdots, \tau_\nu$, 再利用

$$\psi_{m'}^{(\nu)j}=F_{m'm}^{(\nu)}(R_G)\psi_m^{(\nu)j} \tag{3-264}$$

得到其余分量解. 现在 j 不是内禀量子数, 仅仅是个附加指标, 这里除了要求对 j 正交外, 这 τ_ν 组解可任意取.

5. 非正则子群链的情形

如果由群链 $G\supset G(s)$ 中所有各个群的 CSCO-I 所构成的算符集 $(C, C(s))$ 在群 G 的 (ν) 不可约空间只有 $h'_\nu<h_\nu$ 种不同的本征值,则称 $G\supset G(s)$ 为非正则子群链. 这时 $(C, C(s))$ 不构成 (ν) 不可约空间的 CSCO, 它的本征值不足以唯一标志该不可约表示的 h_ν 个不可约基矢,必须引入附加量子数 β 才能唯一标志.

物理应用中经常碰到的一种非正则子群链是 $G\supset G_1\times G_2$, G_1, G_2 为两个互相对易的群,例如

置换群 $\quad S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}(n_1+1, \cdots, n_1+n_2)$.

酉群 $\quad SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$, $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$(见第七章).

假定 $G_1\supset G(s_1)$ 和 $G_2\supset G(s_2)$ 都为正则链, G_1 和 G_2 的 CSCO-II 分别用 $(C_1, C(s_1))$ 和 $(C_2, C(s_2))$ 代表,算符集

$$(C;\ C(s))=(C; C_1,\ C(s_1),\ C_2,\ C(s_2))$$

并不构成群 G 的 CSCO-II. 若我们要求的是 $G\supset(G_1\supset G(s_1))\times(G_2\supset G(s_2))$ [或写成 $G\supset G_1\times G_2\supset G(s_1)\times G(s_2)$] 和 $\bar{G}\supset\bar{G}(s')$ 不可约基 $\psi_{\beta,\mu_1 m_1\mu_2 m_2}^{(\nu)\varkappa}$, 即它属于

$$\underset{\nu}{G}\supset(\underset{\mu_1}{G_1}\supset \underset{m_1}{G(s_1)})\times(\underset{\mu_2}{G_2}\supset \underset{m_2}{G(s_2)}),\ \underset{\nu}{\bar{G}}\supset\underset{\varkappa}{\bar{G}(s')}$$

表示,它满足联立本征方程

$$\begin{pmatrix} C \\ C_1 \\ C(s_1) \\ C_2 \\ C(s_2) \\ \bar{C}(s') \end{pmatrix}\psi_{\beta,\mu_1 m_1\mu_2 m_2}^{(\nu)\varkappa}=\begin{pmatrix} \nu \\ \mu_1 \\ m_1 \\ \mu_2 \\ m_2 \\ \varkappa \end{pmatrix}\psi_{\beta,\mu_1 m_1\mu_2 m_2}^{(\nu)\varkappa}, \tag{3-265}$$

$$\varkappa=\varkappa_1,\ \varkappa_2,\ \cdots,\ \varkappa_{\tau_\nu},\quad \beta=1,\ 2,\ \cdots,\ (\mu_1\mu_2\nu).$$

这里β为附加指标，$(\mu_1\mu_2\nu)$为正整数，代表群G不可约表示(ν)向子群$G_1\otimes G_2$的不可约表示约化时，$G_1\otimes G_2$的不可约表示$((\mu_1),\ (\mu_2))$出现的次数．对给定$(\nu,\ \mu_1,\ m_1,\ \mu_2,\ m_2,\ \varkappa)$(3-265)式有$(\mu_1\mu_2\nu)$组线性独立解，可任意取$(\mu_1\mu_2\nu)$组互相正交(即对指标$\beta$正交)的解．我们只需解出某一$m_1$和某一$m_2$的不可约基矢$\psi^{(\nu)}_{\beta,\mu_1m_1\mu_2m_2}$，其余$m_1'$和$m_2'$的解可利用(3-253)式求出

$$
\begin{aligned}
\psi^{(\nu)\varkappa}_{\beta,\mu_1m_1'\mu_2m_2} &= F^{(\mu_1)}_{m_1'm_1}(R_{G_1})\psi^{(\nu)\varkappa}_{\beta,\mu_1m_1\mu_2m_2},\\
\psi^{(\nu)\varkappa}_{\beta,\mu_1m_1\mu_2m_2'} &= F^{(\mu_2)}_{m_2'm_2}(R_{G_2})\psi^{(\nu)\varkappa}_{\beta,\mu_1m_1\mu_2m_2}.
\end{aligned}
\tag{3-266}
$$

这里R_{G_i}为G_i的生成元．

如果在可约表示$\{\varphi_a\}$中，群G的不可约表示(ν)只出现一次，则(3-265)式中关于$\bar{C}(s')$的方程是多余的，内禀量子数$\varkappa$也是多余的．

6．投影算符法求不可约基

传统群论中求不可约基的基本方法是投影算符法．假定有一组可约基$\{\varphi_a\}$，$a=1,\ 2,\ \cdots,\ N$．从可约基$\{\varphi_a\}$投影出群G不可约基的步骤可归纳为：

(1) 计算由$\{\varphi_a\}$所荷载的可约表示的特征标χ．

(2) 将χ分解成不可约特征标之和，

$$\chi_i=\sum_{\nu}\tau_\nu\chi_i^{(\nu)},$$

τ_ν由(3-250)式给出．

(3) 指定$G\supset G(s)$分类以后，求出群G所有元素的按$G\supset G(s)$分类的不可约矩阵$D^{(\nu)}(R)$．

(4) 从$\{\varphi_a\}$中任选一个，例如φ_1，并选定一个内禀量子数k_1，将由(3-222)式表示的$P^{(\nu)k_1}_m$作用在φ_1上，若作用结果不为零，则就得到了一个不可约基$\psi^{(\nu)}_m$．

(5) 若$P^{(\nu)k_1}_m\varphi_1=0$，则必须改变内禀量子数$k_1$，如果对各种不同的$k$得到的$P^{(\nu)k}_m\varphi_1$全为零，表明$\varphi_1$选得不当，得另选一个$\varphi_1$，重新投影．

(6) 如果不可约表示ν出现的次数$\tau_\nu>1$，且$P^{(\nu)k_1}_m\varphi_1\neq0$，则不断改变$k_1$，我们也许能用同一个$\varphi_1$得到$\tau_\nu$个线性独立但一般说并不相互正交的基矢．如果对于给定φ_1只能找到小于τ_ν个线性独立基矢，那么就必须换一个φ_1，重复这个过程，直到满足我们的要求为止．

从上述步骤可以看到，用投影算符法求不可约基是非常麻烦的，它有以下缺点：

(1) 事先不知道应当如何选择被投影的φ_i和内禀量子数k，只能盲目试探．

(2) 当$\tau_\nu>1$时，选不同的k作出的不可约基，可能是既不独立也不正交，因此必须作线性独立检验，如果τ_ν较大，这种检验就很困难．并且还需将所有的解正交化．

(3) 预先要知道g个群元的不可约矩阵，这对高阶群是十分困难的．例如置换群S_6，$g=6!=720$，所有矩阵元的个数为$g^2=518400$个．因此投影算符对高阶群根本不能用．此外一般书上或文献上只给出群G的某种标准表示的不可约矩阵，如果我们需要的是另一种非标准的分类基，那就得自己先求出这种非标准表示的不可约矩阵．

本征函数法则不需要预先知道任何不可约矩阵元，因此可方便地求出物理上所需要的任一种$G\supset G(s)$分类基．本征函数法另一优点是易于实现程序化，用电子计算机计算．

本节给出的一般方法的具体应用见以后各章．

§ 3.14 表示的直积(Kronecker product)

1. CG 序列

如果 $\psi_{m_1}^{(\nu_1)}(x_1)$ $(m_1=1, 2, \cdots, h_{\nu_1})$ 和 $\varphi_{m_2}^{(\nu_2)}(x_2)$ $(m_2=1, 2, \cdots, h_{\nu_2})$ 分别荷载群 G 的 IR(ν_1)和 IR(ν_2),那么乘积基

$$|m_1m_2\rangle=\psi_{m_1}^{(\nu_1)}(x_1)\varphi_{m_2}^{(\nu_2)}(x_2) \tag{3-267}$$

张开一个 $h_{\nu_1}h_{\nu_2}$ 维空间,给出群 G 的一个新的表示 $D^{(\nu_1\times\nu_2)}$

$$R|m_1m_2\rangle=\psi_{m_1}^{(\nu_1)}(R^{-1}x_1)\varphi_{m_2}^{(\nu_2)}(R^{-1}x_2)=\sum_{m_1'm_2'}D_{m_1'm_1}^{(\nu_1)}(R)D_{m_2'm_2}^{(\nu_2)}(R)|m_1'm_2'\rangle$$

$$=\sum_{m_1'm_2'}D_{m_1'm_2',m_1m_2}^{(\nu_1\times\nu_2)}(R)|m_1'm_2'\rangle, \tag{3-268}$$

$$D_{m_1'm_2',m_1m_2}^{(\nu_1\times\nu_2)}(R)=D_{m_1'm_1}^{(\nu_1)}(R)D_{m_2'm_2}^{(\nu_2)}(R). \tag{3-269}$$

这个新表示称为(ν_1)和(ν_2)表示的直积(Kronecker product),记为$(\nu_1)\times(\nu_2)$,

$$D^{(\nu_1\times\nu_2)}=D^{(\nu_1)}\otimes D^{(\nu_2)}, \tag{3-270}$$

它是群 G 的可约表示(这里$\otimes$代表矩阵的直接乘积). 这个可约表示可约化成 G 的一些不可约表示(ν_3)之和, 即

$$D^{(\nu_1\times\nu_2)}=D^{(\nu_1)}\otimes D^{(\nu_2)}=\sum_{\nu_3}(\nu_1\nu_2\nu_3)D^{(\nu_3)}. \tag{3-271}$$

$(\nu_1\nu_2\nu_3)$是 $D^{(\nu_1)}\otimes D^{(\nu_2)}$ 约化成不可约表示时, $D^{(\nu_3)}$ 出现的次数. 展开式(3-271)称为 CG 序列. 有时(3-271)式也简写成

$$(\nu_1)\times(\nu_2)=\sum_{\nu_3}(\nu_1\nu_2\nu_3)(\nu_3). \tag{3-272}$$

由(3-269)式容易算出 $D^{(\nu_1\times\nu_2)}$ 表示的特征标

$$\chi^{(\nu_1\times\nu_2)}(R)=\sum_{m_1m_2}D_{m_1m_2,m_1m_2}^{(\nu_1\times\nu_2)}(R)=\sum_{m_1m_2}D_{m_1m_1}^{(\nu_1)}(R)D_{m_2m_2}^{(\nu_2)}(R)$$

$$=\chi^{(\nu_1)}(R)\chi^{(\nu_2)}(R). \tag{3-273}$$

令(3-250)式中的 χ_i 为 $\chi_i^{(\nu_1\times\nu_2)}$, 就得到$(\nu_1\nu_2\nu_3)$表达式

$$(\nu_1\nu_2\nu_3)=\sum_i\frac{g_i}{g}\chi_i^{(\nu_1)}\chi_i^{(\nu_2)}\chi_i^{(\nu_3)*}. \tag{3-274}$$

显然对于任何群都有

$$(\nu_1\nu_2\nu_3)=(\nu_2\nu_1\nu_3). \tag{3-275}$$

对于特征标都是实数的群,则有

$$(\nu_1\nu_2\nu_3)=(\nu_2\nu_3\nu_1)=(\nu_3\nu_1\nu_2)=(\nu_2\nu_1\nu_3)=(\nu_3\nu_2\nu_1)=(\nu_1\nu_3\nu_2). \tag{3-276}$$

简单可约群: 如果对群 G 的所有不可约表示 ν_1, ν_2, ν_3 都有$(\nu_1\nu_2\nu_3)\leqslant1$, 则称群 G 为简单可约群,否则称为非简单可约群.

例如转动群为简单可约群, $n\geqslant5$ 的置换群为非简单可约群. 下面看到非简单可约群的 CG 系数要比简单可约群的麻烦得多.

2. 对称乘积和反对称乘积

容易证明当 $\nu_1=\nu_2=\nu$ 时, 乘积表示$(\nu)\times(\nu)$必可分解成对称乘积$[(\nu)\times(\nu)]_s$和反对称乘积$[(\nu)\times(\nu)]_a$两个表示的直和

$$(\nu)\times(\nu)=[(\nu)\times(\nu)]_s\oplus[(\nu)\times(\nu)]_a. \tag{3-277}$$

对称乘积表示$[(\nu)\times(\nu)]_s$的基底为

$$\Psi_{jl}=\frac{1}{\sqrt{2(1+\delta_{jl})}}(\psi_j^{(\nu)}\varphi_l^{(\nu)}+\psi_l^{(\nu)}\varphi_j^{(\nu)}),\quad j\leqslant l=1,\ \cdots,\ h_\nu, \tag{3-278}$$

维数为 $\binom{h_\nu}{2}+h_\nu=\frac{1}{2}h_\nu(h_\nu+1)$，表示矩阵为[1)]

$$D^{[(\nu)\times(\nu)]_s}_{ik,jl}=\frac{1}{\sqrt{(1+\delta_{ik})(1+\delta_{jl})}}[D^{(\nu)}_{ij}D^{(\nu)}_{kl}+D^{(\nu)}_{il}D^{(\nu)}_{kj}]. \tag{3-279}$$

反对称乘积表示 $[(\nu)\times(\nu)]_a$ 的基底为

$$\Phi_{jl}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_j^{(\nu)}\varphi_l^{(\nu)}-\psi_l^{(\nu)}\varphi_j^{(\nu)})^{1)},\quad j<l=1,\ \cdots,\ h_\nu, \tag{3-280}$$

维数为 $\binom{h_\nu}{2}=\frac{1}{2}h_\nu(h_\nu-1)$. 表示矩阵为

$$D^{[(\nu)\times(\nu)]_a}_{ik,jl}=D^{(\nu)}_{ij}D^{(\nu)}_{kl}-D^{(\nu)}_{il}D^{(\nu)}_{kj}. \tag{3-281}$$

§3.15 CG 系 数[2)]

1. CG 系数的定义和性质

把可约基(3-267)式耦合成不可约基

$$\Psi^{(\nu)\tau}_m(x_1,\ x_2)=\sum_{m_1m_2}C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\psi^{(\nu_1)}_{m_1}(x_1)\varphi^{(\nu_2)}_{m_2}(x_2), \tag{3-282}$$

$$\tau=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu_1\nu_2\nu),$$

的系数 $C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$ 称为 *CG 系数*. 这儿 τ 是用来区分同一不可约表示 (ν) 多次出现的情形，又称为*外多重性指标*.

由于 CG 系数是两组正交归一基之间的变换矩阵，所以它满足幺正条件：

$$\sum_{m_1m_2}(C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2})^*C^{(\nu')\tau'm'}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{mm'}, \tag{3-283}$$

$$\sum_{\nu\tau m}(C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2})^*C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}. \tag{3-284}$$

将群 G 的元素 R 作用于(3-282)式左边得

$$R\Psi^{(\nu)\tau}_m=\sum_{m'}D^{(\nu)}_{m'm}(R)\Psi^{(\nu)\tau}_{m'}=\sum_{\substack{m'\\m_1'm_2'}}D^{(\nu)}_{m'm}(R)C^{\nu\tau m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}\psi^{(\nu_1)}_{m_1'}\varphi^{(\nu_2)}_{m_2'}. \tag{3-285}$$

R 作用于(3-282)式右边得

$$R\sum_{m_1m_2}C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\psi^{(\nu_1)}_{m_1}\varphi^{(\nu_2)}_{m_2}=\sum_{\substack{m_1m_2\\m_1'm_2'}}C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(R)\psi^{(\nu_1)}_{m_1'}\varphi^{(\nu_2)}_{m_2'}. \tag{3-286}$$

由于 $\psi^{(\nu_1)}_{m_1'}(x_1)\varphi^{(\nu_2)}_{m_2'}(x_2)$ 线性独立，所以

$$\sum_{m'}C^{\nu\tau m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}D^{(\nu)}_{m'm}(R)=\sum_{m_1m_2}C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1\nu_2m_2}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(R). \tag{3-287}$$

上式左右两边乘以 $(C^{\nu\tau m}_{\nu_1\overline{m}_1,\nu_2\overline{m}_2})^*$，对 ν,τ,m 求和，利用(3-284)式，然后再令 $\overline{m}_1\to m_1,\ \overline{m}_2\to m_2$，得到

$$\sum_{\nu\tau mm'}(C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2})^*C^{(\nu)\tau m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}D^{(\nu)}_{m'm}(R)=D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(R). \tag{3-288}$$

上式左右两边乘以 $D^{(\overline{\nu})*}_{\overline{m}'\overline{m}}(R)$，对 R 求和，利用(3-202a)式，然后再令 $\overline{\nu}\to\nu,\ \overline{m}'\to m',\ \overline{m}\to m$ 得

1) Hamermesh 书上(5-29)和(5-30)式有误，应改为 $(1+\delta_{ik})^{-1}(D^{(\nu)}_{ij}D^{(\nu)}_{kl}\pm D^{(\nu)}_{il}D^{(\nu)}_{kj})$. 由于他用的是非归一基，所以表示矩阵不是对称矩阵.

2) 读者最好先看一看三维转动群的 CG 系数理论(Rose).

$$\frac{1}{g}\sum_R D^{(\nu)*}_{m'm}(R)D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(R)=\frac{1}{h_\nu}\sum_\tau\left(C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\right)^*C^{(\nu)\tau m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}.$$

假定群 G 的不可约矩阵元全为实数，并令上式中 $m'=m,\ m_1'=m_1,\ m_2'=m_2$ 得

$$\frac{1}{g}\sum_R D^{(\nu)}_{mm}(R)D^{(\nu_1)}_{m_1m_1}(R)D^{(\nu_2)}_{m_2m_2}(R)=\frac{1}{h_\nu}\sum_\tau\left|C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\right|^2. \tag{3-289}$$

于是得到一个对称关系

$$\sum_\tau\left|C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\right|^2/h_\nu=\sum_\tau\left|C^{(\nu_2)\tau m_2}_{\nu_1m_1,\nu m}\right|^2/h_{\nu_2}=\sum_\tau\left|C^{(\nu_1)\tau m_1}_{\nu m,\nu_2m_2}\right|^2/h_{\nu_1}. \tag{3-290}$$

当(ν_1)或(ν_2)为恒等表示 I 时，CG 系数非常简单．根据

$$R(\psi^{(\nu_1)}_{m_1}\varphi^{(I)})=(R\psi^{(\nu_1)}_{m_1})(R\varphi^{(I)})=\sum_{m_1'}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R)(\psi^{(\nu_1)}_{m_1'}\varphi^{(I)})$$

可知，$\psi^{(\nu_1)}_{m_1}\varphi^{(I)}$ 仍然是群 G 的(ν_1)不可约基的 m_1 分量．因此有

$$C^{\nu m}_{\nu_1m_1,I}=C^{\nu m}_{I,\nu_1m_1}=\delta_{\nu\nu_1}\delta_{mm_1} \tag{3-291}$$

2．计算 CG 系数的本征函数法

原则上讲，有限群 CG 系数都可用投影算符方法来求，对点群常采用所谓生成元的方法(McWeeny(1963))来求．但这些方法都较麻烦． Butler 和 Wybourne(1976) 最近提出了计算有限群和紧致李群 CG 系数的新方法． 该方法只需用到 CG 系数的一般性质及群的特征标理论，而不需要知道群元的不可约矩阵元． 该方法的另一个特点是先计算拉卡系数后计算 CG 系数．

我们下面只给出计算有限群 CG 系数的本征函数法． 这是一个普适的方法，且易于程序化．

根据 § 3.8要求，(3-282)式为群 $G\supset G(s)$ 不可约基，则它必须是群的 CSCO-II$(C,C(s))$ 的共同本征函数

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\end{pmatrix}\Psi^{(\nu)\tau}_m=\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\Psi^{(\nu)\tau}_m. \tag{3-292}$$

将(3-282)式代入上式，左乘 $\langle m_1'm_2'|$，得到 CG 系数所满足的本征方程

$$\sum_{m_1m_2}\left(\left\langle m_1'm_2'\left|\begin{matrix}C\\C(s)\end{matrix}\right|m_1m_2\right\rangle-\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\right)C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=0, \tag{3-293}$$

$$\tau=1,\ 2,\ \cdots(\nu_1\nu_2\nu).$$

CSCO-II 中任一类算符 C_i 的矩阵元可表为[1]

$$\langle m_1'm_2'|C_i|m_1m_2\rangle=\sum_{l=1}^{g_i}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(R_l^{(i)})D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(R_l^{(i)}). \tag{3-294}$$

当$(\nu_1\nu_2\nu_3)=1$时，可直接解方程(3-293)式得到 CG 系数，而$(\nu_1\nu_2\nu_3)>1$时，可以这样来求 CG 系数：对某一确定的(νm)值，解本征方程(3-293)式，这时可得到$(\nu_1\nu_2\nu_3)$组线性独立解，我们要求它们满足正交条件

$$\langle\Psi^{(\nu)\tau}_m|\Psi^{(\nu)\tau'}_m\rangle=\delta_{\tau\tau'},$$

即

$$\sum_{m_1m_2}\left(C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\right)^*C^{\nu\tau'm}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\delta_{\tau\tau'}. \tag{3-295}$$

这里除了以上正交条件外，这$(\nu_1\nu_2\nu)$组解可以任意取． 求得了$(\nu)_\tau$ 表示 m 分量的解后，所有其余分量 m' 的解可利用(3-264)式得到，即

1) 注意 $\langle m_1'm_2'|C_i|m_1m_2\rangle\neq D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(C_i)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(C_i)$.

$$\Psi^{(\nu)\tau}_{m'}=F^{(\nu)}_{m'm}(R_G)\Psi^{(\nu)\tau}_{m},\quad \tau=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu_1\nu_2\nu). \tag{3-296}$$

将(3-282)式代入上式，左乘 $\langle m_1'm_2'|$ 得

$$C^{(\nu)\tau,m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}=\sum_{m_1m_2}\langle m_1'm_2'|F^{(\nu)}_{m'm}(R_G)|m_1m_2\rangle C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}. \tag{3-297}$$

因此对每一可能的不可约表示(ν)只需针对某一个 m (此m也可任意选取)解方程(3-293)，求出 $C^{\nu_\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$，然后就可由(3-297)式求出其余分量 m' 的 CG 系数.

(3-294)式可看作 C_i 在非耦合表象中的表示矩阵，因此求 CG 系数问题其实就是将非耦合表象变到耦合表象使群 G 的 CSCO-II 对角化.

§3.16 同位标量因子(Isoscalar Factor)

本节要解决的问题是，假定已经知道 $G_1\supset G_1(s)$不可约基$|\Lambda m\rangle$ 的 CG 系数

$$|\Lambda_\theta,m\rangle=\sum_{m_1m_2}C^{\Lambda_\theta,m}_{\Lambda_1m_1,\Lambda_2m_2}|\Lambda_1m_1\rangle|\Lambda_2m_2\rangle, \tag{3-298}$$

$$\theta=1,\ 2,\ \cdots(\Lambda_1\Lambda_2\Lambda),$$

这里 Λ, m 分别代表群 G_1 及其子群链 $G_1(s)$的不可约表示，θ 为区分$(\Lambda_1)\times(\Lambda_2)$表示中，$\Lambda$ 出现不止一次时的多重指标，问如何求出 $G\supset G_1\supset G_1(s)$不可约基的 CG 系数?

群 G 的不可约表示用 ν 标志，群链 $G\supset G_1\supset G_1(s)$不可约基用 $\left|\begin{matrix}(\nu)\\ \beta\Lambda m\end{matrix}\right\rangle$代表，$\beta=1,\ 2,\ \cdots$，$a_\Lambda$ 为附加量子数(或称为内多重性指标)，区分当 $G\to G_1$ 约化时，群 G 的 $IR(\nu)$中，子群 G_1 的 $IR(\Lambda)$出现不止一次的情形：

$$D^{(\nu)}=\sum_\Lambda\oplus a_\Lambda D^{(\Lambda)}, \tag{3-299a}$$

或简写成

$$(\nu)=\sum_\Lambda a_\Lambda\cdot(\Lambda). \tag{3-299b}$$

利用 $G\supset G_1\supset G_1(s)$ CG 系数 $C^{(\nu)\tau,\beta\Lambda m}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1m_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2m_2}$ 可将两个不可约基耦合成一个新的不可约基

$$\left|\begin{matrix}(\nu)_\tau\\ \beta\Lambda m\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\beta_1\Lambda_1m_1\\ \beta_2\Lambda_2m_2}}C^{(\nu)\tau,\beta\Lambda m}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1m_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2m_2}\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1m_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2m_2\end{matrix}\right\rangle, \tag{3-300}$$

$$\tau=1,\ 2,\ \cdots(\nu_1\nu_2\nu).$$

注意，令(3-282)式中的 $m\to\beta\Lambda m$, $m_i\to\beta_i\Lambda_im_i$ 就得到上式.

我们也可以分两步来构成上式左边的波函数

(1) 先用 $G_1\supset G_1(s)$ CG 系数将 $\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1m_1\end{matrix}\right\rangle$和$\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2m_2\end{matrix}\right\rangle$耦合成 $G_1\supset G_1(s)IR$ 基

$$\left[\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2\end{matrix}\right\rangle\right]^{\Lambda_\theta}_m=\sum_{m_1m_2}C^{\Lambda_\theta,m}_{\Lambda_1m_1,\Lambda_2m_2}\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1m_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2m_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{3-301}$$

(2) 然后再将(3-301)式组合成 $G\supset G_1$ 不可约基

$$\left|\begin{matrix}(\nu)_\tau\\ \beta\Lambda m\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\beta_1\Lambda_1\beta_2\Lambda_2\theta}C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}\left[\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2\end{matrix}\right\rangle\right]^{\Lambda_\theta}_m, \tag{3-302}$$

这里 $C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}$ 称为 $G\supset G_1$ 同位标量因子，记为 ISF，τ 为区分$(\nu_1)\times(\nu_2)$表示中IR(ν)出现不止一次时的附加指标. 由(3-300)式—(3-302)式得

$$C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda m}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1 m_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2 m_2}=\sum_\theta C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}C^{\Lambda_\theta,m}_{\Lambda_1 m_1,\Lambda_2 m_2}. \tag{3-303}$$

上式就是 Racah 得出的著名的因式分解引理(Factorization Lemma)，它告诉我们，知道了 $G_1\supset G_1(s)$ 的 CG 系数，只要再计算出 $G\supset G_1$ ISF，就可得到 $G\supset G_1\supset G_1(s)$ 的 CG 系数.

Racah 引理适用于群链中任意一环，这样就可把求整个群链的 CG 系数归结为求每一环的 ISF. 例如若子群链 $G_1(s)=G_2\supset G_3$，则 $G\supset G_1\supset G_2\supset G_3$ 的 CG 系数可示意地表为

$$(G\supset G_1\supset G_2\supset G_3)CGC=(G\supset G_1)\text{ISF}\times(G_1\supset G_2)\text{ISF}\times(G_2\supset G_3)CGC. \tag{3-304}$$

由于 $(G\supset G_1)$ISF 代表(3-302)式左右两套基之间的幺正变换，所以满足幺正条件（对 G_1 的一个确定的 $IR(\Lambda)$）

$$\sum_{\substack{\beta_1\Lambda_1\theta\\ \beta_2\Lambda_2}}(C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2})^*C^{(\nu')_{\tau'},\beta'\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{\beta\beta'}, \tag{3-305}$$

$$\sum_{\nu\tau\beta}(C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2})^*C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_{\theta'}}_{\nu_1\beta_1'\Lambda_1',\nu_2\beta_2'\Lambda_2'}=\delta_{\beta_1\beta_1'}\delta_{\beta_2\beta_2'}\delta_{\Lambda_1\Lambda_1'}\delta_{\Lambda_2\Lambda_2'}\delta_{\theta\theta'}. \tag{3-306}$$

于是(3-302)式可逆展开

$$\left[\left|\begin{matrix}(\nu_1)\\ \beta_1\Lambda_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}(\nu_2)\\ \beta_2\Lambda_2\end{matrix}\right\rangle\right]^{\Lambda_\theta}_m=\sum_{\nu\tau\beta}(C^{(\nu)_\tau,\beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2})^*\left|\begin{matrix}(\nu)_\tau\\ \beta\Lambda m\end{matrix}\right\rangle. \tag{3-307}$$

CG 系数的因式分解公式(3-303)式对李群也适用.

关于 ISF 的计算方法见 § 4.19, § 7.16 和 § 7.17.

本书中所遇到的各种群的 CG 系数或 ISF，除空间群外均为实数. 对实数情形，我们略去复共轭记号 *.

§ 3.17　群 G 的不可约张量

1. 不可约张量的定义

若有一组算符

$$T^{(\nu)}_m,\ m=1,\ 2,\ \cdots,\ h_\nu \tag{3-308a}$$

在群 G 元素 R 作用下的变换性质为

$$RT^{(\nu)}_mR^{-1}=\sum_{m'}D^{(\nu)}_{m'm}(R)T^{(\nu)}_{m'}, \tag{3-308b}$$

则称 $T^{(\nu)}_m$ 为群 G 的不可约张量，或者说 (ν) 不可约张量的第 m 个分量.

如果算符 H 在群 G 作用下不变

$$RHR^{-1}=H$$

或者写成

$$[H,\ R]=0,\quad R\in G, \tag{3-309}$$

则称 H 为群 G 的标量算符，或者说是恒等表示的不可约张量.

我们仍然可用本征函数法来构造有限群的不可约张量. 例如，假定 O_i 为单体算符，S_3 群的不可约张量为

$$O^{(3)}=\sqrt{\frac{1}{3}}(O_1+O_2+O_3)$$

$$O^{(0)}_1=\sqrt{\frac{1}{6}}(O_1+O_2-2O_3) \tag{3-310a}$$

$$O^{(0)}_{-1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(O_1-O_2)$$

如果 O_{ij} 为两体算符，S_3 群的不可约张量为

$$O^{(3)}=\sqrt{\frac{1}{3}}(O_{12}+O_{13}+O_{23}),$$

$$O_1^{(0)}=\sqrt{\frac{1}{6}}(2O_{12}-O_{13}-O_{23}), \tag{3-310b}$$

$$O_{\bar 1}^{(0)}=\sqrt{\frac{1}{2}}(O_{13}-O_{23}).$$

利用群 G 的 CG 系数可将两个不可约张量 $T^{(\nu_1)}$, $U^{(\nu_2)}$ 耦合成另一个不可约张量 $V^{(\nu)\tau}$

$$V_m^{(\nu)\tau}=\sum_{m_1m_2}C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{(\nu)\tau,m}T_{m_1}^{(\nu_1)}U_{m_2}^{(\nu_2)}. \tag{3-311}$$

证明如下

$$\begin{aligned}RV_m^{(\nu)\tau}R^{-1}&=\sum_{m_1m_2}C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{(\nu)\tau m}RT_{m_1}^{(\nu_1)}R^{-1}RU_{m_2}^{(\nu_2)}R^{-1}\\&=\sum_{m_1m_2m_1'm_2'}C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{(\nu)\tau,m}D_{m_1'm_1}^{(\nu_1)}(R)D_{m_2'm_2}^{(\nu_2)}(R)T_{m_1'}^{(\nu_1)}U_{m_2'}^{(\nu_2)}\\&=\sum_{m'm_1'm_2'}D_{m'm}^{(\nu)}(R)C_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}^{(\nu)\tau,m'}T_{m_1'}^{(\nu_1)}U_{m_2'}^{(\nu_2)}=\sum_{m'}D_{m'm}^{(\nu)}(R)V_{m'}^{(\nu)\tau}.\end{aligned} \tag{3-312}$$

这里利用了(3-287)式.

2. Wigner-Eckart 定理

和证明(3-312)式的过程类似，可证明不可约张量 $T_m^{(\nu)}$ 作用在不可约基 $\psi_{m_1}^{(\nu_1)}$ 上再用群 G 的 CG 系数组合成的态

$$\varphi_{m_2'}^{(\nu_2')\tau}=\sum_{mm_1}C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2')\tau,m_2'}T_m^{(\nu)}\psi_{m_1}^{(\nu_1)} \tag{3-313}$$

为群 G 的 $(\nu_2')\tau$ 不可约表示的 m_2' 分量.

利用 CG 系数幺正性(3-284)式，可将上式反展开

$$T_m^{(\nu)}\psi_{m_1}^{(\nu_1)}=\sum_{\nu_2'm_2'\tau}(C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2')\tau,m_2'})^*\varphi_{m_2'}^{(\nu_2')\tau}. \tag{3-314}$$

利用上式可将 $T_m^{(\nu)}$ 的矩阵元表示成

$$\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|T_m^{(\nu)}|\psi_{m_1}^{(\nu_1)}\rangle=\sum_{\nu_2'm_2'\tau}(C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2')\tau,m_2'})^*\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|\varphi_{m_2'}^{(\nu_2')\tau}\rangle \tag{3-315}$$

利用舒尔引理(2-108)式，有

$$\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|\varphi_{m_2'}^{(\nu_2')\tau}\rangle=\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|1|\varphi_{m_2'}^{(\nu_2')\tau}\rangle=\text{const}\cdot\delta_{\nu_2\nu_2'}\cdot\delta_{m_2m_2'}, \tag{3-316a}$$

这里常数 const 和 m, m' 无关，但和 ν_1, ν_2, ν, τ 有关，记为

$$\text{const}=\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle^{(\tau)}, \tag{3-316b}$$

并称为约化矩阵元[1)]. 将(3-316)代入到(3-315)，即得到 Wigner-Eckart 定理：

$$\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|T_m^{(\nu)}|\psi_{m_1}^{(\nu_1)}\rangle=\sum_{\tau}(C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2)\tau,m_2})^*\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle^{\tau}. \tag{3-317}$$

(3-317)式之逆，给出不可约矩阵元

$$\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle^{(\tau)}=\sum_{mm_1}C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2)\tau,m_2}\langle\psi_{m_2}^{(\nu_2)}|T_m^{(\nu)}|\psi_{m_1}^{(\nu_1)}\rangle. \tag{3-318}$$

Wigner-Eckart 定理(3-317)式告诉我们，任何一个不可约张量的矩阵元都可分解成两个因子乘积的和(对指标 τ 求和)，一个为几何因子——CG 系数 $C_{\nu_1m_1,\nu m}^{(\nu_2)\tau,m_2}$，它仅和对称性有关；一个为物理因子——约化矩阵元 $\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle^{(\tau)}$. 和物理本质有关的东西全都包含在约

1) 本书采用 Rose 定义的约化矩阵元. 和 Edmonds 定义的约化矩阵元的关系为

$$\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle=\sqrt{\frac{1}{h_{\nu_2}}}\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle_{\text{Edmonds}}.$$

化矩阵元里．这个定理在物理上有着广泛的应用，见§3.19.

对简单可约群，附加指标 τ 是多余的，这时(3-317)式简化为

$$\langle\psi^{(\nu_2)}_{m_2}|T^{(\nu)}_m|\psi^{(\nu_1)}_{m_1}\rangle=(C^{\nu_2 m_2}_{\nu_1 m_1,\nu m})^*\langle\psi^{(\nu_2)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_1)}\rangle. \tag{3-319}$$

如果 $T^{(\nu)}$ 为群 G 的不变算符 H，令(3-317)式中 $\nu=I$(恒等表示)，并利用(3-291)式，得到

$$\langle\psi^{(\nu_2)}_{m_2}|H|\psi^{(\nu_1)}_{m_1}\rangle=\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{m_1m_2}\langle\psi^{(\nu_1)}\|H\|\psi^{(\nu_1)}\rangle=E_{\nu_1}\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{m_1m_2}. \tag{3-320}$$

这表明群 G 的不变算符 H 在群 G 不可约表示中为一单位矩阵的一个倍数，这正好就是§2.10的舒尔引理.

Griffith 详细地讨论了点群的不可约张量．Vanagas 讨论过置换群的不可约张量.

Wigner-Eckart 定理(3-317)式对紧致李群也完全适用.

§3.18　CG 系数和 ISF 的对称性

1．由于 $(\nu_1)\times(\nu_2)$ 和 $(\nu_2)\times(\nu_1)$ 有相同的 CG 序列，因此必定有

$$C^{(\nu)_\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\epsilon_1 C^{(\nu)_\tau,m}_{\nu_2m_2,\nu_1m_1}, \tag{3-321}$$

这里 $\epsilon_1=\epsilon_1(\nu_1\nu_2\nu_\tau)$ 为相因子，当 $\nu_1\neq\nu_2$ 时，ϵ_1 决定于位相约定，当 $\nu_1=\nu_2$ 时，若 (ν) 属于对称乘积，则 $\epsilon_1=1$，若 (ν) 属于反对称乘积，则 $\epsilon_1=-1$.

2．我们用 $(\bar{\nu})$ 和 $(\bar{m})$ 分别代表群 G 的 $IR(\nu)$ 及其子群链 $G(s)$ 的 $IR(m)$ 的 contragredient 表示(即复共轭表示)，即

$$D^{(\bar{\nu})}_{\bar{m}'\bar{m}}(R)=D^{(\nu)*}_{m'm}(R). \tag{3-322}$$

将(3-287)式取复共轭，并利用(3-322)式得到

$$C^{(\nu)_\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\epsilon_2(C^{(\bar{\nu})_\tau,\bar{m}}_{\bar{\nu}_1\bar{m}_1,\bar{\nu}_2\bar{m}_2})^*, \tag{3-323}$$

这里 $\epsilon_2=\epsilon_2(\nu_1\nu_2\nu_\tau)$ 为位相因子.

3．将(3-308b)式取厄米共轭，得

$$RT^{(\nu)\dagger}_m R^{-1}=\sum_{m'}D^{(\nu)*}_{m'm}(R)T^{(\nu)\dagger}_{m'},$$

即 $T^{(\nu)\dagger}_m$ 按 ν 的复共轭表示变换．于是

$$T^{(\nu)\dagger}_m=T^{(\bar{\nu})}_{\bar{m}}. \tag{3-324a}$$

因此有

$$\langle\nu_1m_1|T^{(\nu)}_m|\nu_2m_2\rangle=\langle\nu_1m_1|T^{(\bar{\nu})\dagger}_{\bar{m}}|\nu_2m_2\rangle. \tag{3-324b}$$

利用 Wigner-Eckart 定理(先假定 $(\nu)\times(\nu_2)$ 和 $(\nu)\times(\nu_1)$ 为简单可约)得

$$(C^{\nu_1m_1}_{\nu m,\nu_2m_2})^*\langle\nu_1\|T^{(\nu)}\|\nu_2\rangle=C^{\nu_2m_2}_{\bar{\nu}\bar{m},\nu_1m_1}\langle\nu_2\|T^{(\bar{\nu})}\|\nu_1\rangle^*. \tag{3-325}$$

将上式平方，对 m_1, m_2, m 求和，利用 CG 系数的幺正性，得到

$$\sqrt{h_{\nu_1}}\,|\langle\nu_1\|T^{(\nu)}\|\nu_2\rangle|=\sqrt{h_{\nu_2}}\,|\langle\nu_2\|T^{(\bar{\nu})}\|\nu_1\rangle|. \tag{3-326a}$$

将(3-326a)代入(3-325)并利用(3-323)和(3-321)式，得到 CG 系数的另一个对称性.

$$\sqrt{\frac{1}{h_\nu}}\,C^{(\nu)m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\epsilon_3\sqrt{\frac{1}{h_{\nu_1}}}\,C^{(\bar{\nu}_1)\bar{m}_1}_{\bar{\nu}\bar{m},\nu_2m_2}. \tag{3-327a}$$

如果多重性大于1，则(3-326a)式被下式所代替

$$h_{\nu_1}\sum_\tau|\langle\nu_1\|T^{(\nu)}\|\nu_2\rangle^{(\tau)}|^2=h_{\nu_2}\sum_\tau|\langle\nu_2\|T^{(\bar{\nu})}\|\nu_1\rangle^{(\tau)}|^2, \tag{3-326b}$$

因此，一般说来得不到对称性(3-327a)式.

当群 G 的不可约表示全为实表示时（这时 $\bar{\nu}$ 和 ν 重合，$\bar{\nu}_1$ 和 ν_1 重合等），CG 系数满足(3-290)式。Hamermesh 证明，这时如果选取适当的线性组合，可使 CG 系数满足对称性

$$\sqrt{\frac{1}{h_\nu}}\, C^{(\nu)_\tau, m}_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2} = \epsilon_3' \sqrt{\frac{1}{h_{\nu_1}}}\, C^{(\nu_1)_\tau, m_1}_{\nu m, \nu_2 m_2}. \tag{3-327b}$$

由 CG 系数的对称性，可得出 ISF 的对称性。

1．

$$C^{(\nu)_\tau, \beta\Lambda_\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1, \nu_2\beta_2\Lambda_2} = \eta_1 C^{(\nu)_\tau, \beta\Lambda_\theta}_{\nu_2\beta_2\Lambda_2, \nu_1\beta_1\Lambda_1}. \tag{3-328}$$

当 $\nu_1 \neq \nu_2$ 时，位相 η_1 决定于位相约定。

2．当多重性 θ 为 1 时，由(3-323)和(3-303)得到

$$C^{(\nu)_\tau, \beta\Lambda}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1, \nu_2\beta_2\Lambda_2} = \eta_2 \left(C^{(\bar{\nu})_\tau, \beta\bar{\Lambda}}_{\bar{\nu}_1\beta_1\bar{\Lambda}_1, \bar{\nu}_2\beta_2\bar{\Lambda}_2}\right)^*. \tag{3-329}$$

3．当多重性 τ 和 θ 都为 1 时

$$\sqrt{\frac{h_\Lambda}{h_\nu}}\, C^{(\nu), \beta\Lambda}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1, \nu_2\beta_2\Lambda_2} = \eta_3 \sqrt{\frac{h_{\Lambda_1}}{h_{\nu_1}}}\, C^{(\bar{\nu}_1), \beta_1\bar{\Lambda}_1}_{\bar{\nu}\beta\bar{\Lambda}, \nu_2\beta_2\Lambda_2}. \tag{3-330a}$$

当全为实表示时有

$$\sqrt{\frac{h_\Lambda}{h_\nu}}\, C^{(\nu)_\tau, \beta\Lambda\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1, \nu_2\beta_2\Lambda_2} = \eta_3' \sqrt{\frac{h_{\Lambda_1}}{h_{\nu_1}}}\, C^{(\nu_1)_\tau, \beta_1\Lambda_1\theta}_{\nu\beta\Lambda, \nu_2\beta_2\Lambda_2}. \tag{3-330b}$$

§3.19　群论在量子力学中的应用

群论在量子力学中有着广泛的应用，这里只谈几点基本精神。

1．G 为系统哈密顿 H 的对称群

(1) 简化求解薛定谔方程

若 $\{\varphi_a\}$，$a=1, 2, \cdots, n$ 为系统哈密顿 H 的一个非对角表象。系统的能量由以下久期方程决定

$$\|\langle\varphi_a|H|\varphi_b\rangle - E\delta_{ab}\|_1^n = 0. \tag{3-331}$$

我们可先按群论方法将 n 个 φ_a 组合成群 G 的不可约基

$$\Psi^{(\nu)\varkappa}_m = \sum_{a=1}^{n} a^{(\nu)\varkappa}_{m,a}\varphi_a,\quad \nu=1, 2, \cdots, N,\ m=1, 2, \cdots, h_\nu,\ \varkappa=1, 2, \cdots, \tau_\nu. \tag{3-332}$$

根据维数相等有

$$n = \sum_{\nu=1}^{N} \tau_\nu h_\nu. \tag{3-333}$$

这里 $\varkappa$ 为除 ν, m 以外的附加量子数(不一定也不仅仅是内禀量子数)。根据舒尔引理或(4-320)式，上式可简化为 N 个小的久期方程

$$\|\langle\psi^{(\nu)\varkappa}|H|\psi^{(\nu)\varkappa'}\rangle - E\delta_{\varkappa\varkappa'}\|_1^{\tau_\nu} = 0,\quad \nu=1, 2, \cdots, N. \tag{3-334}$$

这里
$$\langle\psi^{(\nu)\varkappa}|H|\psi^{(\nu)\varkappa'}\rangle = \langle\psi^{(\nu)\varkappa}_m|H|\psi^{(\nu)\varkappa'}_m\rangle,$$
因其值和 m 无关，干脆略去下标 m。(3-334) 式中每个方程的阶数为 $IR(\nu)$ 在可约表示 $\{\varphi_a\}$ 中出现的次数 τ_ν，一般说 $\tau_\nu \ll n$，因此大大简化了薛定谔方程的求解。

哈密顿 H 的本征函数可表为

$$\Psi^{(\nu)}_m(E) = \sum_{\varkappa=1}^{\tau_\nu} a_{E\varkappa}\psi^{(\nu)\varkappa}_m.$$

由上式可知，如果某一 $IR(\nu)$ 只出现一次 $(\tau_\nu=1)$，则该不可约基就是 H 的本征函数。

(2) 用群 G 的 CSCO-II 的本征值标志能级

因为$[H, G]=0$, 因此自然有

$$[H, C]=0, \ [H, C(s)]=0. \tag{3-335}$$

即C, $C(s)$都为守恒量, 因此 CSCO-II$(C, C(s))$的本征值(ν, m)为好量子数, 可用来标志属于同一个能级的各个波函数[但一般说(νm)不足以唯一标志一条能级].

(3) 根据定理1, 哈密顿H的本征空间L_E是群G的一个表示空间, 给出一个表示$\mathscr{D}$, 一般说来$\mathscr{D}$是可约的.

非偶然简并: 如果表示$\mathscr{D}$为不可约, 例如$\mathscr{D}=D^{(\nu)}$, 则能级E的简并度等于不可约表示ν的维数h_ν. 这种简并称为非偶然简并, 它完全来自系统固有的对称性. 在这种情形下, 能量为E的h_ν个简并波函数构成对称群G的一个不可约基, 而群G的CSCO-II的本征值为区分这些简并态提供了足够的量子数.

偶然简并: 若表示$\mathscr{D}$为可约, $\mathscr{D}=\sum_\nu \theta_\nu D^{(\nu)}$. 则该能级的简并度为$\sum_\nu \theta_\nu h_\nu$. 有时把此类情形统称为偶然简并. 不过实际上我们应区分如下两种情形: (a) 简并确是偶然出现的. 例如调节哈密顿中的某个参数, 可使两条能级人为地重合. 这类简并是真正的偶然简并. (b) 简并不是偶然出现的, 而是带有系统性的. 这种情形的出现往往是一种信号, 告诉我们这种简并并不是偶然的, 而是来源于某种尚未知道的更高的对称性, 这时我们最好不要用"偶然"简并这个名词. 例如氢原子的势能为$V=-\frac{A}{r}$. 显而易见的对称群为三维转动群R_3. 我们知道氢原子的能量只依赖于主量子数n, 而和角量子数l无关. 因为l是R_3群不可约表示的标志(见§6.3), 因此由n能级的所有简并波函数所荷载的R_3群的表示$\mathscr{D}_n$是可约的, $\mathscr{D}_n=\sum_{l=0}^{n}\oplus D^{(l)}$. 这种简并不是偶然的, 而是由于氢原子具有比$R_3$更高的对称群——四维转动群$R_4$(见 Wybourne).

对碱金属原子, 势能为$V=-\frac{A}{r}+\frac{\epsilon}{r^2}$. l不同的能级不再简并, 只保留对磁量子数m的简并性. 这种$2l+1$度简并是非偶然简并, 它是有心力场的共同特性.

2. 系统对称性降低引起能级分裂

若$H=H_0+H_1$, H_0为主要项, H_1为微扰项, 且

$$[H_0, G]=0, \ [H_1, G_1]=0, \quad 但[H_1, G]\neq 0. \tag{3-336}$$

而G_1为G的子群, $G\supset G_1$. 这时候如果我们选$G\supset G_1\supset G_1(s)$分类基$\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}$[$G_1(s)$为$G_1$的子群链, $G_1(s)$的选取可以任意, 只要$G_1\supset G_1(s)$为一正则链就行了], $\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}$分别属于G, G_1和$G_1(s)$的$IR(\nu)$, Λ和m, 则由(3-320)式得

$$\langle\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}|H_0|\psi^{(\nu')}_{\Lambda' m'}\rangle=E^{(0)}_\nu\delta_{\nu\nu'}\delta_{\Lambda\Lambda'}\delta_{mm'}, \tag{3-337a}$$

$$\langle\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}|H_1|\psi^{(\nu')}_{\Lambda' m'}\rangle=E^{(1)}_{\nu\nu'\Lambda}\delta_{\Lambda\Lambda'}\delta_{mm'}, \tag{3-337b}$$

对角元

$$\langle\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}|H_1|\psi^{(\nu)}_{\Lambda m}\rangle=E^{(1)}_{\nu\Lambda}. \tag{3-337c}$$

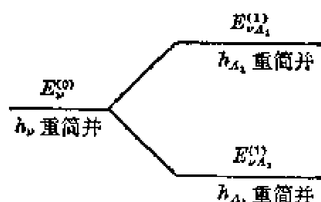


图3.19 对称性降低引起能级分裂

没有微扰时, 系统的对称性为G; ν, Λ, m均为好量子数, 每一条能级$E^{(0)}_\nu$的简并度[1]为h_ν. 加上微扰后, 系统对称性降低到G_1, 这时只有Λ和m为好量子数, ν为近似量子数. 原来一条能级$E^{(0)}_\nu$现在分裂成几条子能级(见图3.19). 分裂的能级数目等于群G $IR(\nu)$中包含的G_1的$IR(\Lambda)$的数目, 分裂的大小由

1) 不考虑偶然简并, 下同.

(3-337c)式决定，每条子能级的简并度为群 G_1 IR(Λ)的维数 h_Λ. 由此看到，根据群表示论的分析，不必具体计算也不必知道哈密顿的精确形式，就可预言能级分裂的情况. 利用 $G\supset G_1\supset G_1(s)$ 分类波函数，由(3-327c)式还可方便地算出能级分裂的大小.

基本粒子理论中的 Gell-Mann-Okubo 质量公式(见 Swart(1963))就是应用上述理论的极好例子.

由上面讨论可知，对于有微扰的问题，我们可根据物理对称性降低的具体情况，选取相应的群链 $G\supset G_1\supset G_1(s)$，这种群链下的不可约基就是考虑微扰后的近似波函数(即没有考虑 ν 不同的能级之间的混合).

3. 动力学对称性

如果一个系统的哈密顿是群链 $G\supset G_1\supset G_2\supset\cdots$ 中各子群的 CSCO 的函数，则我们说该系统具有动力学对称性. 令 C_i 为 G_i 的 CSCO

$$H=F(C,\ C_1,\ C_2,\ \cdots)=F(C,\ C(s)) \tag{3-338a}$$

式中 $C(s)=(C_1,\ C_2,\ \cdots)$. 这时 $[H,\ G]\neq 0$, 即 G 不是 H 的对称群，但

$$[H,\ C]=0,\ [H,\ C(s)]=0, \tag{3-338b}$$

因此 $(C,\ C(s))$ 的量子数 $(\nu, m)=(\nu, \mu_1, \mu_2, \cdots)$ 是好量子数. 我们自然选 $G\supset G_1\supset G_2\supset\cdots$ 不可约基 $\psi_m^{(\nu)}$，在此基底上，哈密顿为对角，因此不需解薛定谔方程，就可得出能量的解析表达式

$$E=F(\nu,\ \mu_1,\ \mu_2,\ \cdots)=F(\nu,\ m). \tag{3-338c}$$

现在同一不可约表示 ν 但不同分量指标 m 的能级不再简并，但属于不同的不可约表示的状态之间不会相混合.

动力学对称性的例子有

(a) 基本粒子的夸克模型，群链为 $SU_3\supset SU_2$ 或 $SU_4\supset SU_3\supset SU_2$ 等.

(b) 原子核的互作用玻色子模型中(Arima 和 Iachello, 1976, 1978)，有三种群链

$$SU_6\supset SU_5\supset SO_5\supset SO_3,$$
$$SU_6\supset SU_3\supset SO_3,$$
$$SU_6\supset SO_6\supset SO_3.$$

关于 SU_n 群和 SO_n 群的定义见第五章.

4. 一般情形

对于不属于以上三类的一般情形，群论仍然是一种处理多体问题的重要工具. 我们可选一条合适的群链 $G\supset G(s)$，采用 $G\supset G(s)$ 不可约基，利用拉卡的母分系数或其它技术，计算哈密顿的矩阵表示并将其对角化. 所谓合适的群链指(1) $G(s)$ 中包含系统的对称群. (2)我们很容易求出这一群链下的母分系数或很容易直接计算哈密顿在此分类基上的矩阵元. 这种把系统的对称群纳入一更大的群 G(G 不是系统的对称群)的群链的做法叫做嵌入(embed).

如果把相互作用项也展开成同一 $G\supset G(s)$ 分类的不可约张量算符之和，我们就可利用 Wigner-Eckart 定理进行计算.

5. 选择规则

如果使系统能级间发生跃迁的算符是系统对称群 G 的不可约张量 $T_m^{(\nu)}$，则属于群 GIR (ν_i) 和 (ν_f) 的两个状态间的跃迁振幅比例于

$$\langle\psi_{m_f}^{(\nu_f)}|T_m^{(\nu)}|\psi_{m_i}^{(\nu_i)}\rangle=\sum_\tau\left(C^{(\nu_f)\tau,m_f}_{\nu_i m_i,\nu m}\right)^*\langle\psi^{(\nu_f)}\|T^{(\nu)}\|\psi^{(\nu_i)}\rangle^{(\tau)}. \tag{3-339}$$

这里利用了 Wigner-Eckart 定理 (3-317) 式．如果群 G 的 CG 序列 (3-274) 式中的系数 $(\nu_i\nu\nu_f)=0$，则上式中的 CG 系数必为零，因此跃迁振幅(3-339)式等于零．由此可见，根据对称群 G 的 CG 序列就可判断那些跃迁是禁戒的．

当多重性为 1 时(3-329)式还表示从同一个初态 $\psi_{m_i}^{(\nu_i)}$ 到不同末态 $\psi_{m_f}^{(\nu_f)}$ (具有同一 ν_f 不同 m_f 的末态)的跃迁强度之比

$$|\langle\psi_{m_f'}^{(\nu_f)}|T_{m'}^{(\nu)}|\psi_{m_i}^{(\nu_i)}\rangle|^2/|\langle\psi_{m_f}^{(\nu_f)}|T_m^{(\nu)}|\psi_{m_i}^{(\nu_i)}\rangle|^2=(C^{\nu_f m_f'}_{\nu_i m_i,\nu m'})^2/(C^{\nu_f m_f}_{\nu_i m_i,\nu m})^2.$$

因此单从 CG 系数就可推知相对跃迁强度．

关于群论在多粒子体系中进一步的应用见第九章(注意，本节所讨论的内容对单粒子或多粒子体系都同样适用)．

§3.20 小　结

本章介绍了用本征函数法处理有限群表示的一般理论．其基本内容可归纳为以下七个定理．

定理 I　群 G 的第一类完备算符集在类空间的本征算符 $P^{(\nu)}$ 即为到群 G 的 (ν) 不可约表示的投影算符

$$CP^{(\nu)}=\nu P^{(\nu)},$$

$$P^{(\nu)}=\frac{h_\nu}{g}\sum_i\chi_i^{(\nu)*}C_i. \tag{3-340}$$

定理 II　群 G 的第一类完备算符集在类上函数空间的本征函数就是特征标的复共轭

$$C\chi^{(\nu)*}(C_i)=\nu\chi^{(\nu)*}(C_i). \tag{3-341}$$

CSCO-I 的本征函数满足正交、归一完备性

$$\sum_{i=1}^N\frac{g_i}{g}\chi^{(\nu)*}(C_i)\chi^{(\nu')}(C_i)=\delta_{\nu\nu'}. \tag{3-342}$$

$$\sum_{\nu=1}^N\frac{g_i}{g}\chi^{(\nu)*}(C_i)\chi^{(\nu)}(C_j)=\delta_{ij}. \tag{3-343}$$

由(3-341)式和(3-342)式就可定出特征标 $\chi^{(\nu)}(C_i)$．

定理 III　$\psi^{(\nu)}$ 属于群 G 的不可约表示 (ν) 的充要条件是 $\psi_m^{(\nu)}$ 满足本征方程

$$C\psi^{(\nu)}=\nu\psi^{(\nu)}. \tag{3-344}$$

定理 IV　$\psi_m^{(\nu)}$ 属于群 $G\supset G(s)$ IR$(\nu,\ m)$的充要条件是 $\psi^{(\nu)}$ 满足本征方程

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}=\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}. \tag{3-345}$$

如果 $G\supset G(s)$ 为正则子群链，则 $(C,\ C(s))$ 称为群 G 的第二类完备算符集 CSCO-II．

定理 V　$\psi_m^{(\nu)\kappa}$ 为 $G\supset G(s)$ 分类基 (ν,m)，$\bar G\supset\bar G(s')$ 分类基 (ν,κ) 的充要条件是 $\psi_m^{(\nu)\kappa}$ 满足本征方程

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\\\bar C(s')\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)\kappa}=\begin{pmatrix}\nu\\m\\\kappa\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)\kappa}. \tag{3-346}$$

这里内禀子群链 $\bar G(s')$ 不一定和子群链 $G(s)$ 相对应．

如果 $G \supset G(s)$ 为正则子群链，则 $K=(C, C(s), \bar{C}(s))$ 称为群 G 的第三类完备算符集 CSCO-III.

定理 VI CSCO-III 在群空间的本征算符就是广义投影算符 $P_m^{(\nu)k}$

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} P_m^{(\nu)k} = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} P_m^{(\nu)k}. \tag{3-347}$$

$$P_m^{(\nu)k} = \frac{h_\nu}{g} \sum_a D_{mk}^{(\nu)*}(R_a) R_a. \tag{3-348}$$

定理 VII CSCO-III 在群上函数空间的本征函数就是群 G 不可约矩阵元的复共轭 $D_{mk}^{(\nu)*}(R_a)$,

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} D_{mk}^{(\nu)*}(R_a) = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} D_{mk}^{(\nu)*}(R_a). \tag{3-349}$$

CSCO-III 的本征函数满足正交、归一、完备性

$$\sum_a \frac{h_\nu}{g} D_{mk}^{(\nu)*}(R_a) D_{m'k'}^{(\nu')}(R_a) = \delta_{\nu\nu'} \delta_{mm'} \delta_{kk'} \tag{3-350a}$$

$$\sum_{\nu m k} \frac{h_\nu}{g} D_{mk}^{(\nu)*}(R_a) D_{mk}^{(\nu)}(R_b) = \delta_{ab}. \tag{3-350b}$$

由 (3-349) 式和 (3-350a) 式可定出不可约矩阵元 $D_{mk}^{(\nu)}(R_a)$.

第四章 置换群表示理论

置换群的表示，经过 Young、Frobenious、Yamanouchi 等人的努力，就理论体系而言，已经相当完善．但是从物理工作者的观点来看，有两个缺点：一是理论体系本身太庞大，要搞懂这一套理论太费事；二是在实用上如求置换群特征标、不可约基、CG系数等很麻烦．但是它也有不少优点，那就是从这套理论中得到的一些普遍结论却比较简单和直观．例如用杨图杨盘标志 IR 和 IR 基；不可约表示维数的普遍公式；S_n 群 IR 向子群 S_{n-1} 约化时的所谓分支律(branching law)等都可根据简单规则求得．

从上一章有限群表示的一般理论以及 S_3 群特例看到，群表示论的新途径是一种独立的理论．这种理论的优点是理论体系十分简单，它和量子力学中的表象理论十分接近，对各种群各种问题的处理方法统一，而且实用上方便，把求特征标、IR 基和 IR 矩阵元、CG 系数等都简化为求某一 CSCO 的本征值和本征函数，适合于机器计算．把它用于置换群时，它也有缺点，即普遍性结论比较少，如 IR 的维数、约化分支律等，都需通过具体计算而得到，没有一个普遍的简单的规则．

由此看到置换群表示的本征函数理论和传统的 Young-Yamanouchi 理论各有优缺点，它们的优缺点刚好是互补的．因此从实用观点来看，我们可以把二者的优点结合起来，给出一种十分简单的方法来处理置换群表示问题．

本章前四节着重介绍新、老置换群表示理论之间的关系和置换群表示传统理论中的一些很有用的普遍结论．这些结论本身并不复杂，但论证过程比较麻烦(可参看 Hamermesh 1962, Rutherford 1948)．从应用的观点看来，其实只要了解这些结论就够了．下面几节则讲一下如何利用传统理论的这些普遍结论来简化本征函数法的计算．

§4.1 配分、杨图和 CSCO-I 的本征值

置换群传统理论中都用配分(partition)或杨图(Young diagram)来标志置换群 S_n 的不可约表示．

配分：正整数 n 的配分是指 n 的这样一种分拆：

$$n=\nu_1+\nu_2+\cdots+\nu_n,\qquad \nu_1\geqslant\nu_2\geqslant\cdots\geqslant\nu_n\geqslant 0. \tag{4-1}$$

其中 ν_i 都是正整数．例如 $4=4+0+0+0$, $4=3+1+0+0$, $4=3+1+0+0$, $4=2+2+0+0$, $4=2+1+1+0$, $4=1+1+1+1$．我们用 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]$ 标志 n 的一个配分，以后略去为 0 的那些 ν_i．于是 $n=4$ 的配分有以下几种：[4]，[31]，[22]，[211]，[1111]，或写成[4]，[31]，[2^2]，[21^2]，[1^4]．传统置换群理论证明了 n 的每一个配分标志了一个不可约表示，n 的配分数也就是 S_n 群的不等价的不可约表示数．

杨图：配分也可用一图案——杨图来表示，对应配分$[\nu]$的图是 n 个方格的这样一个图案，第一行有 ν_1 个相连的方格，第二行有 ν_2 个相连的方格，……，前一行的方格数大于或等于后一行的方格数，合起来是 n 个方格．例如 $n=4$ 的各种配分对应的杨图如下：

[4]　　[31]　　[22]　　[211]　　[1^4]

$$(4\text{-}2)$$

CSCO-I 的本征值和配分或杨图是一一对应的. 可以证明[见后面(4-25)式和(7-38d)式]二循环和三循环类算符的本征值和配分 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_k]$ 的关系为:

$$\lambda_{(2)}^{(\nu)}=\frac{n}{2}+\frac{1}{2}\sum_{l=1}^{k}\nu_l(\nu_l-2l),$$
$$\lambda_{(3)}^{(\nu)}=\frac{1}{3}\left\{2n-\frac{3}{2}n^2+\sum_{l=1}^{k}\nu_l\left[\nu_l^2-\left(3l-\frac{3}{2}\right)\nu_l+3l(l-1)\right]\right\}. \tag{4-3a}$$

表 3.2-1 列出了本征值和配分 $[\nu]$ 的对应关系. 因此可以把配分或杨图当作一种标志 CSCO-I 本征值(也即标志不可约表示)的记号.

至于为什么 n 的一个配分标志了 S_n 群的一个不可约表示, 我们可以再作一点解释: 由上面讨论可知, n 的一个配分 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]$ 对应着 S_n 群的一个类 $(\nu)=(\nu_1\nu_2\cdots\nu_n)$, n 有多少种配分, S_n 群也就有多少个类. 有限群不等价不可约表示数又刚好等于类的数目, 由此可以理解 n 的一个配分对应着 S_n 群的一个不可约表示.

根据配分唯一标志置换群 IR 这一事实, 利用(4-3a)式及其推广(如四循环类算符的本征值和配分的关系等), 可不难定出置换群的 CSCO. 例如: 若 n 的所有配分 $[\nu]$ 所对应的 $\lambda_2^{(\nu)}$ 均不相等, 则 $C_{(2)}$ 就是 S_n 群的 CSCO. 若否, 我们再看本征值对 $(\lambda_{(2)}^{(\nu)}, \lambda_{(3)}^{(\nu)})$, 如果它们均不相等, 则 $(C_{(2)}, C_{(3)})$ 为 S_n 群的 CSCO, 等等.

共轭杨图: 将杨图 $[\tilde{\nu}]$ 行列互换得到的另一个杨图, 称为 $[\nu]$ 的共轭杨图, 记为 $[\tilde{\nu}]$. 如(4-2)式中, 杨图[31]和[211]互为共轭.

自轭杨图: 若杨图 $[\tilde{\nu}]=[\nu]$, 则称 $[\nu]$ 为自轭杨图, 如(4-2)式中 $[\nu]=[22]$ 为自轭杨图.

共轭表示和自轭表示: 由杨图 $[\tilde{\nu}]$ 和 $[\nu]$ 标志的表示, 称做互为共轭表示. 由自轭杨图标志的表示称做自轭表示.

显然 S_n 群的共轭表示总是成对出现的.

下一节将证明共轭表示 $[\tilde{\nu}]$ 所对应的本征值

$$\lambda_{(2)}^{(\tilde{\nu})}=-\lambda_{(2)}^{(\nu)}, \qquad \lambda_{(3)}^{(\tilde{\nu})}=\lambda_{(3)}^{(\nu)}. \tag{4-3b}$$

因此表 3.2-1 中只列出了 $\lambda_{(2)}^{(\nu)}\geqslant 0$ 的配分和本征值对照表.

§4.2 置换群的特征标

Frobenius 的理论已经彻底解决了置换群的特征标问题, 这个理论在传统群表示理论中占有重要地位, 在代数技巧上也可称是个典范, 它给出的求特征标的公式内容是如此丰富, 以至研究它的应用也成了专门学问, 但真用它来计算特征标也决不是一件容易的事. 下面给出由 Frobenius 公式导出的置换群不可约表示 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_k]$ 的维数公式 [Bohr, IC]

$$h_{[\nu]}=\chi_e^{(\nu)}=n!\prod_{i<j\leqslant k}(\nu_i-\nu_j+j-i)\Big/\prod_{i=1}^{k}(\nu_i+k-i)!. \tag{4-4a}$$

Robinson 给出了(4-4a)式的简易计算法

$$h_{[\nu]}=n!/\text{杨图中各方格的曲距之积} \tag{4-4b}$$

这儿一个方格的曲距(hook length)定义为该方格右面和下面的方格数之和加1. 例如

$$h_{[31]}=\frac{4!}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 4&2&1\\\hline 1\\\cline{1-1}\end{array}}=\frac{4!}{4\cdot 2\cdot 1\cdot 1}=3,$$

$$h_{[321]}=\frac{6!}{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 5&3&1\\\hline 3&1\\\cline{1-2} 1\\\cline{1-1}\end{array}}=\frac{6!}{5\cdot 3\cdot 3\cdot 1\cdot 1\cdot 1}=16,$$

注意,这里方格内填的数字为该方格的曲距.

S_6 以内的置换群不可约表示的维数见书末附表 A1.

S_7 以内的置换群特征标见(Hamermesh p. 276.) S_{10} 以内的特征标表见(Littlewood).

本征函数法计算置换群特征标也不麻烦(见§3.11),高美娟等(1976)用此方法在"719"电子计算机上计算了 S_{11} 群的特征标表.

习　　题

1. 用(4-4b)式计算 S_3-S_6 群 IR 的维数

共轭表示的特征标: 传统置换群理论中(Hamermesh),证明了共轭表示的特征标满足以下关系:

$$\chi_i^{(\tilde{\nu})}=\delta_i\chi_i^{(\nu)}, \tag{4-5}$$

上式中 δ_i 为 i 类置换算符的置换宇称. 用本征函数法很容易证明(4-5)式.

假定 S_n 群的 CSCO-I 为 $C=(C_1, \cdots, C_l)$, 由(3-28)式得到 $q_j^{(\nu)}$ 满足以下联立本征方程

$$\sum_{j=1}^{N} C_{ij}^{k}q_j^{(\nu)}=\lambda_i^{(\nu)}q_k^{(\nu)}, \quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ l. \tag{4-6}$$

由于 $C_iC_j=\sum\limits_k C_{ij}^kC_k$, 式中左右两边置换宇称必须相等,故置换群结构常数 C_{ij}^k 必须满足

$$C_{ij}^k=0, \quad \text{当 } \delta_i\delta_j\neq\delta_k \text{ 时}. \tag{4-7}$$

由以上两式,可知下面式子也一定成立.

$$\sum_{j=1}^{N} C_{ij}^{k}(\delta_jq_j^{(\nu)})=(\delta_i\lambda_i^{(\nu)})(\delta_kq_k^{(\nu)}), \quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ l. \tag{4-8}$$

由此可知,若 S_n 群的 CSCO-I 有一个本征值 $\lambda^{(\nu)}=(\lambda_1^{(\nu)}\cdots\lambda_l^{(\nu)})$, 则它必有另一个本征值

$$\lambda^{(\tilde{\nu})}=(\delta_1\lambda_1^{(\nu)},\ \cdots\delta_l\lambda_l^{(\nu)}) \tag{4-9a}$$

而 $IR(\tilde{\nu})$ 对应的本征矢量为

$$q_j^{(\tilde{\nu})}=\delta_jq_j^{(\nu)}, \quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ N. \tag{4-9b}$$

利用 $\chi_j^{(\nu)}=\sqrt{g}\,q_j^{(\nu)*}$[(3-245)式],即得到(4-5)式. (4-9a)式就是(4-3b)式的推广.

§4.3 分支律, Young-Yamanouchi 基, 杨盘

分支律: 置换群 S_n 的 $IR[\nu]$ 相对于其子群 $S_{n-1}\equiv S_{n-1}(1, 2, \cdots, n-1)$ 来说一般是可约的. 传统置换群表示论证明了,若用杨图 $[\nu]$ 标志 S_n 群的不可约表示,则从杨图 $[\nu]$ 中按所有可能方式去掉一个方块后所剩下的杨图 $[\nu']$ (注意 $[\nu']$ 必须构成一个杨图)就给出该表

示中所包含的 S_{n-1} 群的各种不可约表示，而且 S_{n-1} 群的每一个不可约表示只出现一次。

例如：S_8 群 $IR[431]$ 中包含的 S_7 群的 $IR[43]$，$[421]$ 和 $[331]$ 各一次

$$[431] \longrightarrow [43] \oplus [421] \oplus [331] \tag{4-10}$$

维数 70 = 14 + 35 + 21

分支律可用以下式子来表达

$$[\nu_1\nu_2\cdots\nu_i\cdots\nu_n] = \sum_{i=n}^{1}{}'[\nu_1,\ \nu_2,\ \cdots\nu_i-1,\ \cdots\nu_n], \tag{4-11a}$$

带撇和号代表求和时必须满足 $\nu_i-1\geqslant 0$ 和 $\nu_i-1\geqslant\nu_{i+1}$。由上式左右两边维数相等得

$$h_{[\nu_1\cdots\nu_i\cdots\nu_n]} = \sum_{i=n}^{1}{}' h_{[\nu_1\cdots\nu_i-1\cdots\nu_n]} \tag{4-11b}$$

Young-Yamanouchi 基

$S_n\supset S_{n-1}\supset\cdots\supset S_2\supset S_1$ 分类基称为置换群的标准基，又称为 Young-Yamanouchi 基，它是一种正交归一基，这里

$$S_f=S_f(1,\ 2,\ \cdots,\ f),\quad f=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2,\ 1.$$

由于分支律(4-11)式，S_f 群的不可约表示约化到它的子群 S_{f-1} 的不可约表示时，S_{f-1} 的每一个 IR 只出现一次，再加上群链的末环 S_2(下面看到，最后的 S_1 其实是多余的)为阿贝尔群，它的 IR 都是一维的，因此群链 $S_n\supset S_{n-1}\supset\cdots\supset S_2$ 为正则子群链，我们简称为整链。

杨盘：§3.4 我们已经引入过 S_3 群的杨盘(Young tableau)，现在给杨盘下一个普遍定义：

在 S_n 群杨图 $[\nu]$ 上按下面规则填上 1，2，…，n 个数字所构成的一个图称为*杨盘*，这规则要求我们在任一行自左向右或任一列自上向下阅读时，这些数字必须是按增加次序排列的。我们用 $Y_m^{[\nu]}$ 来代表一个杨盘，m 为杨盘的编号。

我们可用杨盘来标志 S_n 的标准基 $|Y_m^{[\nu]}\rangle$。它的意义是按这样来规定的：在杨盘 $Y_m^{[\nu]}$ 中去掉方块 n，得到涉及 $n-1$ 个数的一个盘 $Y_{m'}^{[\nu']}$，再去掉方块 $n-1$，得到另一个盘 $Y_{m''}^{[\nu'']}$ 等等。规定不可的基矢 $|Y_m^{[\nu]}\rangle$ 是这样一种基矢，它分别属于群 $S_n, S_{n-1}, S_{n-2},\ \cdots S_1$ 的 $IR[\nu]$，$[\nu']$，$[\nu'']$，$\cdots[1]$。

例如 S_5 群的一个杨盘 (1 3 4 / 2 5) 标志的标准基分别属于 S_5，S_4，S_3，S_2，S_1 的不可约表示 $[32]$，$[31]$，$[21]$，$[11]$ 和 $[1]$：

1 3 4 / 2 5 ⟶ 1 3 4 / 2 ⟶ 1 3 / 2 ⟶ 1 / 2 ⟶ 1

[32] [31] [21] [11] [1]

置换群正则链的最后一环总是 S_1，对应的 IR 一定为 $[1]$，所以可去掉。

根据分支律(4-11a)可知，用一串配分 $[\nu]$，$[\nu']$，$[\nu'']$，$\cdots[1]$ 或用杨盘 $Y_m^{[\nu]}$ 来标志 S_n 群的基矢是一种完备的标志，即不可能有两个基矢对应于同一个 $Y_m^{[\nu]}$，而对于每一个 $Y_m^{[\nu]}$，必有一个相应的基矢。由此显然可知，S_n 群 $IR[\nu]$ 的维数等于从杨图 $[\nu]$ 中所能作出的杨盘的总数。

Yamanouchi 数：

标准基除了用杨盘标志外，也可等价地用 Yamanouchi 数$(r_n, r_{n-1}, \cdots, r_2, r_1)$标志，这儿$r_i$给出数$i(i=n, n-1, \cdots, 1)$在杨盘中所处的行号，根据构造杨盘的规则，1 总是在第一行，所以$r_1\equiv1$.

通常这样来规定杨盘或 Yamanouchi 数的编号，如果有两个 Yamanouchi 数$r=(r_n, r_{n-1}, \cdots, r_1)$和$r'=(r'_n, r'_{n-1}, \cdots, r'_1)$，若$r_n>r'_n$或$r_n=r'_n$, $r_{n-1}>r'_{n-1}$, …等则认为$r>r'$. 我们把r最大的编为第 1 号，次大的为第 2 号…等，这种编号顺序称为"in decreasing page order". 以后我们一律取这种编号顺序. 例如

杨盘	1 2 3 4	1 2 4 3	1 3 4 2
Yamanouchi 数	(2111)	(1211)	(1121)
编号	1	2	3

显然 Yamanouchi 数愈大，所对应的编号愈小.

S_6以内的杨盘及其编号列在表 4.4-1, S_3-S_5群的 Yamanouchi 数列在表 4.4-2.

§4.4 置换群标准矩阵元

根据标准基是$S_n\supset S_{n-1}\supset\cdots\supset S_2$分类基，分支律(4-11)式以及(2-101)式立即可知，若R为子群S_{n-1}的元素，则S_n群$[\nu]$不可约表示矩阵$D^{[\nu]}(R)$必取准对角形式（已约形式）

$$D^{[\nu_1\cdots\nu_i\cdots\nu_n]}(R)=\sum_{i=n}^{1}{}' \oplus D^{[\nu_1\cdots\nu_i-1\cdots\nu_n]}(R),\ R\in S_{n-1}. \tag{4-12}$$

例如对应于(4-10)式有

$$D^{[431]}(R)=\begin{pmatrix} D^{[43]}(R) & & \\ & D^{[421]}(R) & \\ & & D^{[331]}(R) \end{pmatrix},\qquad R\in S_7 \tag{4-13}$$

更具体的例子见表 4.4-2.

S_n群的$n-1$个相邻对换$(12)(23)\cdots(n-1, n)$构成S_n群的生成元，如果知道了它们的IR矩阵，根据(1-8a), (1-9)式等利用矩阵相乘就可得到所有群元的IR矩阵. 根据置换群传统理论(Hamermesh)，相邻对换$(i-1, i)$的IR矩阵可利用下面公式很方便地求得：

(a) 当$i-1$和i在S_n群的杨盘$Y_m^{[\nu]}$中处于同一行或同一列时

$$(i-1, i)|Y_m^{[\nu]}\rangle=\pm|Y_m^{[\nu]}\rangle,\quad \text{当 } i-1 \text{ 和 } i \text{ 处于同一}\genfrac{}{}{0pt}{}{\text{行}}{\text{列}}. \tag{4-14a}$$

(b) 当$i-1$和i不在同一行或列时

$$D_{m'm}^{[\nu]}(i-1, i)=\langle Y_{m'}^{[\nu]}|(i-1, i)|Y_m^{[\nu]}\rangle=\begin{cases}1/\sigma & \text{当 } m'=m,\\ \sqrt{\sigma^2-1}/|\sigma|, & \text{当 } Y_{m'}^{[\nu]}=(i-1, i)Y_m^{[\nu]},\\ 0 & \text{其它情形,}\end{cases} \tag{4-14b}$$

式中σ为杨盘$Y_m^{[\nu]}$中从指标$i-1$到达i的轴距. 轴距的定义为：规定沿着杨盘向上或右移一格为$+1$，向下或向左移一格为-1，从$i-1$出发沿着直角形路线到达i总共经过的方格的代数和就是轴距σ. 例如杨盘 [1 2 4 / 3 5] 和 [1 2 3 / 4 5] 中，3 到 4 的轴距分别为$+3$和-3,

于是

$$
\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2}\end{array} \right|(34)\left| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2}\end{array} \right\rangle=+\frac{1}{3},\quad
\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array} \right|(34)\left| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array} \right\rangle=-\frac{1}{3}
$$

$$
\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5\\\cline{1-2}\end{array} \right|(34)\left| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array} \right\rangle=\frac{\sqrt{8}}{3},\quad
\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2}\end{array} \right|(34)\left| \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\\hline 3&4\\\cline{1-2}\end{array} \right\rangle=0 \tag{4-15}
$$

轴距 σ 可按以下公式计算

$$
\sigma=c_i-c_{i-1}-(r_i-r_{i-1}), \tag{4-16}
$$

这里 $r_i(c_i)$ 为指标 i 在杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 上所处的行(列)号.

§4.20 附录中将用本征函数法非常方便地导出(4-14b)式(Zhu and Chen, 1982).

注意区分杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 和标准基 $|Y^{[\nu]}_m\rangle$, 当 $Y^{[\nu]}_{m'}=(i-1,i)Y^{[\nu]}_m$ 时, $(i-1,i)|Y^{[\nu]}_m\rangle\neq|Y^{[\nu]}_{m'}\rangle$, 而应根据(4-14b)式得到

$$
(i-1,\ i)\,|Y^{[\nu]}_m\rangle=\frac{1}{\sigma}\left|\ Y^{[\nu]}_m\right\rangle+\frac{\sqrt{\sigma^2-1}}{|\sigma|}\left|\ Y^{[\nu]}_{m'}\right\rangle. \tag{4-17}
$$

(4-14a)式中取相邻对换的非对角矩阵元永远大于等于零. 这种位相约定称为 Young-Yamanouchi 标准位相. 本书也采用这一位相约定.

表 4.4-1 S_3-S_6 群 Yamanouchi 基位相因子 $A^{[\nu]}_m$ 1), 杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 及其所对应的本征值 $\lambda=\sum_{f=3}^{n}(2f-5)\lambda_f$ 2)

$[\nu]$	[21]		[31]			[22]		[211]		
m	1	2	1	2	3	1	2	1	2	3
A^{ν}_m	+	−	+	−	+	+	−	+	−	+
Y^{ν}_m	12 3	13 2	123 4	124 3	134 2	12 34	13 24	12 3 4	13 2 4	14 2 3
λ			9	6		0		−6		

$[\nu]$	[41]				[32]					[311]					
m	1	2	3	4	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	6
A^{ν}_m	+	−	+	−	+	−	+	+	−	+	−	+	+	−	+
Y^{ν}_m	1234 5	1235 4	1245 3	1345 2	123 45	124 35	134 25	125 34	135 24	123 4 5	124 3 5	134 2 5	125 3 4	135 2 4	145 2 3
λ	46	34	31		19	16		10		9	6		−6		

$[\nu]$	[221]					[2111]				[51]				
m	1	2	3	4	5	1	2	3	4	1	2	3	4	5
A^{ν}_m	+	−	−	+	−	+	−	+	−	+	−	+	−	+
Y^{ν}_m	12 34 5	13 24 5	12 35 4	13 25 4	14 25 3	12 3 4 5	13 2 4 5	14 2 3 5	15 2 3 4	12345 6	12346 5	12356 4	12456 3	13456 2
λ	−10		−16			−31				134	109	97	94	

1) $A^{[\nu]}_m$ 的定义见 §4.7 第 4 小节.

2) 其意义见(4-31)式. 全对称 IR 基的 λ 值为:

[3]	[4]	[5]	[6]
3	21	76	176

（续表）

$[\nu]$	[42]									[411]					
m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	2	3	4	5	6
Λ_m^ν	+	−	+	−	+	−	+	+	−	+	−	+	−	+	−
Y_m^ν	1234 56	1235 46	1245 36	1345 26	1236 45	1246 35	1346 25	1256 34	1356 24	1234 5 6	1235 4 6	1245 3 6	1345 2 6	1236 4 5	1246 3 5
λ	81	69	66		54	51		45		67	55	52		30	27

$[\nu]$	[411]				[33]					[321]					
m	7	8	9	10	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	6
Λ_m^ν	+	+	−	+	+	−	+	+	−	+	−	+	+	−	−
Y_m^ν	1346 2 5	1256 3 4	1356 2 4	1456 2 3	123 456	124 356	134 256	125 346	135 246	123 45 6	124 35 6	134 25 6	125 34 6	135 24 6	123 46 5
λ		15			40	37		31		19	16		10		9

$[\nu]$	[321]										[222]				
m	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	1	2	3	4	5
Λ_m^ν	+	−	−	+	−	−	+	+	−	+	+	−	−	+	−
Y_m^ν	124 36 5	134 26 5	125 36 4	135 26 4	145 26 3	126 34 5	136 24 5	126 35 4	136 25 4	146 25 3	12 34 56	13 24 56	12 35 46	13 25 46	14 25 36
λ	6		−6			−10		−16			−31		−37		

$[\nu]$	$[31^3]$										[2211]				
m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5
Λ_m^ν	+	−	+	+	−	+	−	+	−	+	+	−	−	+	−
Y_m^ν	123 4 5 6	124 3 5 6	134 2 5 6	125 3 4 6	135 2 4 6	145 2 3 6	126 3 4 5	136 2 4 5	146 2 3 5	156 2 3 4	12 34 5 6	13 24 5 6	12 35 4 6	13 25 4 6	14 25 3 6
λ	−12	−15		−27			−52				−45		−51		

$[\nu]$	[2211]				$[21^4]$				
m	6	7	8	9	1	2	3	4	5
Λ_m^ν	+	−	+	−	+	−	+	−	+
Y_m^ν	12 36 4 5	13 26 4 5	14 26 3 5	15 26 3 4	12 3 4 5 6	13 2 4 5 6	14 2 3 5 6	15 2 3 4 6	16 2 3 4 5
λ	−66				−94				

由(4-14)式可知，标准基$|Y_m^{[\nu]}\rangle$对于在杨盘$|Y_m^{[\nu]}$中处于同一行(列)的相邻指标为对称(反对称)，对于其它指标(如同一行(列)内不相邻的指标或既不在同一行又不在同一列的指标)则没有确定对称性(即为部分对称部分反对称，有关S_3群的例子见§3.4)．例如以下不可约基

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1 & 2 & 3 & 11 \\ \hline 4 & 7 & 8 \\ \cline{1-3} 5 & 9 & 12 \\ \cline{1-3} 6 & 10 \\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle$$

对1, 2, 3对称，对7, 8也对称，对4, 5, 6反对称，对9, 10也反对称．其余数之间就既不对称也不反对称．此外，显见杨图$[n]$($[1^n]$)代表全对称(全反对称)表示．

表4.4-2给出了S_3-S_5群相邻置换的Yamanouchi矩阵元(略去了全对称和全反对称表示)，又因为它们都是对称矩阵，故只给出对角线上方的矩阵元，(12)矩阵的左边给出Yamanouchi数，它所对应的杨盘则列在表4.4-1．

习　　题

1．求S_6群相邻置换的标准表示矩阵．

表4.4-2　S_3-S_5群相邻置换的Yamanouchi矩阵元

S_3:

(12)　211, 121: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & -1 \end{pmatrix}$　(23): $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$

S_4:

(12)　2111, 1211, 1121: $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 \\ & & -1 \end{pmatrix}$　(23): $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ & & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$　(34): $\begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 \\ & \frac{1}{3} & 0 \\ & & 1 \end{pmatrix}$

(12)　3211, 3121, 1321: $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & -1 & 0 \\ & & -1 \end{pmatrix}$　(23): $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ & \frac{1}{2} & 0 \\ & & -1 \end{pmatrix}$　(34): $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ & -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} \\ & & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$

(12)　2211, 2121: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & -1 \end{pmatrix}$　(23): $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$　(34): $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & -1 \end{pmatrix}$

S_5:

(12)　21111, 12111, 11211, 11121: $\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 \\ & & & -1 \end{pmatrix}$　(23): $\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & 0 & 0 \\ & & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ & & & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$　(34): $\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 \\ & & \frac{1}{3} & 0 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$　(45): $\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{15}}{4} & 0 & 0 \\ & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 \\ & & & 1 \end{pmatrix}$

(续表)

$$
\begin{matrix}22111\\21211\\21121\\12211\\12121\end{matrix}
\overset{(12)}{\left(\begin{array}{ccc|cc}
1 & & & & \\
 & 1 & & & \\
 & & -1 & & \\
\hline
 & & & 1 & \\
 & & & & -1
\end{array}\right)}
\qquad
\overset{(23)}{\left(\begin{array}{ccc|cc}
1 & 0 & 0 & & \\
 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \multicolumn{2}{c}{0} \\
 & & \frac{1}{2} & & \\
\hline
 & & & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\
 & & & & \frac{1}{2}
\end{array}\right)}
$$

$$
\overset{(34)}{\left(\begin{array}{ccc|cc}
-\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 & & \\
 & \frac{1}{3} & 0 & \multicolumn{2}{c}{0} \\
 & & 1 & & \\
\hline
 & & & 1 & 0 \\
 & & & & -1
\end{array}\right)}
\qquad
\overset{(45)}{\left(\begin{array}{ccccc}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\
 & & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\
 & & & \frac{1}{2} & 0 \\
 & & & & \frac{1}{2}
\end{array}\right)}^{1)}
$$

$$
\begin{matrix}32111\\31211\\31121\\13211\\13121\\11321\end{matrix}
\overset{(12)}{\left(\begin{array}{ccc|ccc}
1 & & & & & \\
 & 1 & & & & \\
 & & -1 & & & \\
\hline
 & & & 1 & & \\
 & & & & -1 & \\
 & & & & & -1
\end{array}\right)}
\qquad
\overset{(23)}{\left(\begin{array}{ccc|ccc}
1 & 0 & & & & \\
 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & & 0 & \\
 & & \frac{1}{2} & & & \\
\hline
 & & & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\
 & & & & \frac{1}{2} & 0 \\
 & & & & & -1
\end{array}\right)}
$$

$$
\overset{(34)}{\left(\begin{array}{ccc|ccc}
-\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & 0 & & & \\
 & \frac{1}{3} & 0 & & & \\
 & & 1 & & & \\
\hline
 & & & -1 & 0 & 0 \\
 & & & & -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} \\
 & & & & & \frac{1}{3}
\end{array}\right)}
\qquad
\overset{(45)}{\left(\begin{array}{cccccc}
-1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & -\frac{1}{4} & 0 & \frac{\sqrt{15}}{4} & 0 & 0 \\
 & & -\frac{1}{4} & 0 & \frac{\sqrt{15}}{4} & 0 \\
 & & & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\
 & & & & \frac{1}{4} & 0 \\
 & & & & & 1
\end{array}\right)}
$$

$$
\begin{matrix}32211\\32121\\23211\\23121\\21321\end{matrix}
\overset{(12)}{\left(\begin{array}{cc|ccc}
1 & & & & \\
 & -1 & & & \\
\hline
 & & 1 & & \\
 & & & -1 & \\
 & & & & -1
\end{array}\right)}
\qquad
\overset{(23)}{\left(\begin{array}{cc|ccc}
-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & & & \\
 & \frac{1}{2} & & 0 & \\
\hline
 & & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\
 & & & \frac{1}{2} & 0 \\
 & & & & -1
\end{array}\right)}
$$

1) Hamermesh p. 229 给的(45), (15), (25), (35)矩阵是错误的。

(续表)

(34)
$$\left(\begin{array}{cc|ccc} 1 & 0 & & 0 & \\ & -1 & & & \\ \hline & & -1 & 0 & 0 \\ & & & -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} \\ & & & & \frac{1}{3} \end{array}\right)$$

(45)
$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ & -\frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ & & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ & & & \frac{1}{2} & 0 \\ & & & & -1 \end{pmatrix}$$

[2111] Young diagram; basis: 43211, 43121, 41321, 14321

(12)
$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ \hline & & & -1 \end{array}\right)$$

(23)
$$\left(\begin{array}{ccc|c} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & \\ & \frac{1}{2} & 0 & \\ & & -1 & \\ \hline & & & -1 \end{array}\right)$$

(34)
$$\left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & \\ & -\frac{1}{3} & \frac{\sqrt{8}}{3} & \\ & & \frac{1}{3} & \\ \hline & & & -1 \end{array}\right)$$

(45)
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ & -1 & 0 & 0 \\ & & -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{15}}{4} \\ & & & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

§ 4.5 置换群的 CSCO-II

对应于 $S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_2$ 分类基，按 § 3.8, S_n 群的 CSCO-II 照理应当由正则链 $S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_2$ 中的 $n-1$ 个群的 CSCO-I 所组成

$$M = (C(n),\ C(n-1),\ \cdots,\ C(2)). \tag{4-18}$$

这里的 $C(f)$ $(f=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2)$ 为 S_f 群的 CSCO-I. 对 $6 \leqslant f \leqslant 14$ 时 $C(f)$ 包括二循环和三循环类算符 $C_{(2)}(f)$, $C_{(3)}(f)$; $f \geqslant 15$ 时还要包含更多的类算符. 现在我们来证明算符集 $(C(n),\ C(n-1),\ \cdots C(2))$ 是过完备的，即构成 S_n 群的 CSCO-II, 不需要这么多算符. 事实上我们有

定理 群链 $S_n \supset S_{n-1} \supset \cdots \supset S_2$ 的 $n-1$ 个二循环类算符 $(C_{(2)}(n), C_{(2)}(n-1), \cdots C_{(2)}(2))$ 构成 S_n 群的 CSCO-II.

证明 要证明此定理等价于要证明 $(n-1)$ 个二循环类算符的本征值 $\lambda_n \lambda_{n-1} \cdots \lambda_2$ 唯一标志了 S_n 群的一个不可约基. $n \leqslant 5$ 时，由于 CSCO-I 本来只包含一个二循环类算符，所以结论自然成立. 现在我们进一步证明，如果对 S_f 成立，则对 S_{f+1} 也成立. 这等价于证明，若 S_{f+1} 群有 m 个杨图 $[\nu^1] \cdots [\nu^m]$ 对应于同一本征值 λ_{f+1}, 令 $[\bar{\nu}_i]$ 为杨图 $[\nu^i]$ 中去掉一个方块后所剩下的各种杨图(见图 4.5-1), 则 i 不相同的各种 $[\bar{\nu}_i]$ 必不相同. 这又等价于证明: 若 $[\mu^i]$ 为在 S_f 群杨图 $[\bar{\nu}] = [\nu_1 \nu_2 \cdots]$ 中加一个方块后所得到的各种杨图(见图 4.5-2)

$$[\mu^i] = [\nu_1,\ \nu_2,\ \cdots \nu_{i-1},\ \nu_i + 1,\ \nu_{i+1},\ \cdots], \tag{4-19}$$

则各杨图 $[\mu^i]$ 所对应的本征值 $\lambda_{f+1}^{(i)}$ 全不相等，即 $\lambda_{f+1}^{(i)} \neq \lambda_{f+1}^{(j)}$, 对 $i \neq j$.

S_{f+1}: $[\nu^1]$ $[\nu^2]$ $\cdots$ $[\nu^m]$
λ_{f+1} λ_{f+1} λ_{f+1}
↙↘ ↙↘ ↙↘
S_f: $[\bar{\nu}^1]$ $\cdots$ $[\bar{\nu}^2]$ $\cdots$ $[\bar{\nu}^m]$ $\cdots$

图 4.5-1a

S_9: [522] [441]
λ_9 (6) (6)
↙ ↘ ↙ ↘
S_8: [521] [42²] [44] [431]

图 4.5-1b

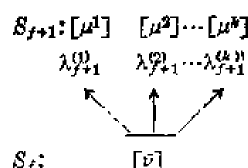


图 4.5-2a

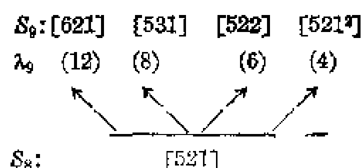


图 4.5-2b

由(4-3a)式和(4-19)式得

$$\lambda_{f+1}^{(i)}=(f+1)/2+\frac{1}{2}\sum_{l}(\nu_l+\delta_{il})(\nu_l+\delta_{il}-2l) \tag{4-20}$$

若 $\lambda_{f+1}^{(i)}=\lambda_{f+1}^{(j)}$，则由上式得

$$\nu_i-i=\nu_j-j. \tag{4-21}$$

假定 $i<j$，根据杨图规则必有 $\nu_i\geqslant\nu_j$，因此上式只有当 $i=j$ 时才成立．若 $i>j$，则必有 $\nu_i\leqslant\nu_j$，故上式仍然只有 $i=j$ 时才成立，证毕．

因此 S_{f+1} 群的 $C_{(2)}(f+1)$ 的本征值相同的两个不同的不可约表示在向 S_f 群的 IR 约化时其约化途径必定不相同(例如见图 4.5-1b)．上述结论适用于正则链中任一环．由此可知，即使在类空间中 λ_n 的本征值有简并，但本征值集(λ_n, λ_{n-1}, $\cdots\lambda_2$)仍唯一标志置换群的一个标准基．

为了书写方便，我们以后就用 $C(f)$ 代表 S_f 群的二循环类算符．少数地方要用 $C(f)$ 代表 CSCO-I 的，则加以特别说明．

上述结论可以从图 4.5-3 很直观地看出．图中配分下圆括号内的数值为本征值 λ_f．从 S_6 群的一个配分出发，每一串箭头所经过的本征值集($\lambda_6,\lambda_5,\cdots\lambda_2$)就标志 S_6 群的一个不可约基矢．我们称这样一串箭头连成的线为一条"航线"．从一个配分[ν]出发到达终点[1]的航线总数即为 $IR(\nu)$ 的维数 h_ν．可以看到 λ_6 相同的两个 IR，如[33]和[411]，它们的约化途径是不一样的．因此 λ_5 可能存在的简并毫不影响我们用(λ_6, λ_5, $\cdots\lambda_2$)唯一标志 S_6 的一个标准基矢．

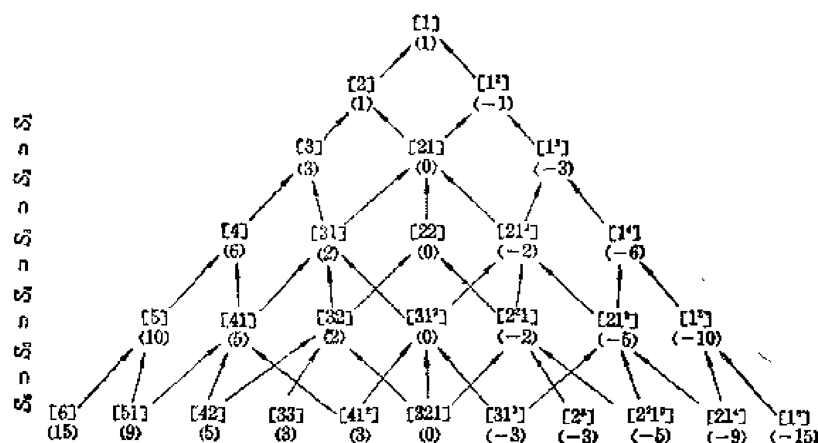


图 4.5-3 S_6 群分支律图

由此我们得出一个重要结论：我们可以用($n-1$)个量子数(λ_n, λ_{n-1}, $\cdots$, λ_2)唯一标志 S_n 群的一个标准基，以代替没有量子数意义的 n 个 Yamanouchi 数(r_n, r_{n-1}, $\cdots$, r_2, r_1)[1)] 我们以 S_6 群的[411]和[33]表示为例，将 S_6 群标准基的三种标志方法列在表 4.5 以便对

1) $r_1=1$，因此也可以说代替($n-1$)个 Yamanouchi 数(r_n, r_{n-1}, $\cdots$, r_2)．

照. 第一行是用 5 个量子数($\lambda_6, \lambda_5, \lambda_4, \lambda_3, \lambda_2$)标志的, 第二行是用 Yamanouchi 数标志的, 第三行是用杨盘标志的.

表 4.5 S_6 群的[411]和[33]表示的标准基

ψ_λ	$\psi_{3,5,6,3,1}$	$\psi_{3,5,2,3,1}$	$\psi_{3,5,2,0,1}$	$\psi_{3,5,2,0,-1}$	$\psi_{3,0,2,3,1}$
$\psi(r)$	$\psi(321111)$	$\psi(312111)$	$\psi(311211)$	$\psi(311121)$	$\psi(132111)$
标准杨盘	1 2 3 4 / 5 / 6	1 2 3 5 / 4 / 6	1 2 4 5 / 3 / 6	1 3 4 5 / 2 / 6	1 2 3 6 / 4 / 5
ψ_λ	$\psi_{3,2,2,3,1}$	$\psi_{3,2,2,0,1}$	$\psi_{3,2,2,0,-1}$	$\psi_{3,2,0,0,1}$	$\psi_{3,2,0,0,-1}$
$\psi(r)$	$\psi(222111)$	$\psi(221211)$	$\psi(221121)$	$\psi(212211)$	$\psi(212121)$
标准杨盘	1 2 3 / 4 5 6	1 2 4 / 3 5 6	1 3 4 / 2 5 6	1 2 5 / 3 4 6	1 3 5 / 2 4 6

由此可知, 规定一个基在正则子群链每一环 S_f 属于那一个 IR, 实际上也就是规定了 CSCO-II 的一套量子数. 对物理工作者来说, 一套量子数标志了一个 IR 基是很好理解的. 利用本征值标志置换群的 IR 基还具有下列一些特点:

(1) 标志 S_n 群一个 IR 基的 $(n-1)$ 个量子数 $(\lambda_n, \lambda_{n-1}, \cdots\lambda_f, \cdots\lambda_2)$ 中的任一个 λ_f, 除了表明 IR 基 ψ_λ 属于 S_f 的 $IR(\lambda_f)$ 外, 平均讲来, 它还代表由 $\psi_\lambda=\psi_m^{[\nu]}$ 所描述的 n 个粒子体系的波函数中, 头 f 个粒子中对称对的数目和反对称对的数目之差. 我们可以这样来理解这一结论. 在利用

$$\lambda_n^{[\nu]}=\left\langle\psi_m^{[\nu]}\left|\sum_{i>j=1}^{n}(ij)\right|\psi_m^{[\nu]}\right\rangle$$

来计算对换 (ij) 的平均值时, 我们把 $\psi_m^{[\nu]}$ 展开成以下形式

$$\psi_m^{[\nu]}=S_{ij}\psi_{ij}^{(s)}+A_{ij}\psi_{ij}^{(a)}.$$

这里 $\psi_{ij}^{(s)}(\psi_{ij}^{(a)})$ 代表 i, j 为对称(反对称)的态. 于是

$$\lambda_n^{[\nu]}=\sum_{i>j=1}^{n}(|S_{ij}|^2-|A_{ij}|^2)=n_s-n_a. \tag{4-22}$$

因此量子数 λ_n 是 $IR(\lambda_n)$ 中对称对多少的一种量度, $(\lambda_n)_{\max}=\binom{n}{2}$ 代表全对称表示 $[n]$, $(\lambda_n)_{\min}=-\binom{n}{2}$ 代表全反对称表示 $[1^n]$.

现在我们来求 $\lambda_n^{[\nu]}$ 和配分 $[\nu]$ 的关系. 令 $|Y_1^{[\nu]}\rangle$ 为 Yamanouchi 数最大的基矢, 将 $C(n)$ 拆成三部分

$$C(n)=\sum_{j>i=1}^{n}(ij)=T_r+T_c+T_m, \tag{4-23a}$$

这里 $T_r(T_c)$ 为杨盘 $Y_1^{[\nu]}$ 中处于同一行(列)的指标 i, j 之间的对换之和, T_m 则为既不在同一行也不在同一列的指标 i, j 之间的对换之和. 令 A 为杨盘 $Y_1^{[\nu]}$ 的列反对称化算符的乘积, 例如若

$$Y_1^{[\nu]}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5\\\cline{1-2} 6\\\cline{1-1}\end{array}$$

则 $$A=\mathscr{A}(146)\mathscr{A}(45)$$

这里 $\mathscr{A}$ 为反对称化算符

$$\mathscr{A}(i_1i_2\cdots i_n)=\frac{1}{n!}\sum\delta_p\cdot p,\quad p\in S_n(i_1\cdots i_n).$$

A 自然和类算符对易

$$[C(n),\ A]=0. \tag{4-23b}$$

此外 A 也和 T_c 对易

$$[T_c,\ A]=0. \tag{4-23c}$$

因此

$$[T_r+T_m,\ A]=0. \tag{4-23d}$$

利用(4-23d)得到

$$\begin{aligned}C(n)A|Y_1^{[\nu]}\rangle&=AT_r|Y_1^{[\nu]}\rangle+T_cA|Y_1^{[\nu]}\rangle+AT_m|Y_1^{[\nu]}\rangle\\&=(\sum_i\nu_i(\nu_i-1)/2-\sum_i\mu_i(\mu_i-1)/2)A|Y_1^{[\nu]}\rangle+AT_m|Y_1^{[\nu]}\rangle.\end{aligned} \tag{4-24a}$$

这里$[\mu_1\mu_2\cdots]=[\tilde{\nu}]$是$[\nu]$的共轭杨图．以下证明 $AT_m|Y_1^{[\nu]}\rangle=0$．根据

$$\begin{matrix}i\cdots j\\ \vdots\\ k\end{matrix}\xrightarrow{(ij)}\begin{matrix}j\cdots i\\ \vdots\\ k\end{matrix}\xrightarrow{(jk)}\begin{matrix}k\cdots i\\ \vdots\\ j\end{matrix}\xrightarrow{(ik)}\begin{matrix}i\cdots k\\ \vdots\\ j\end{matrix}$$

可知 $$(jk)=(ik)(jk)(ij)$$

这里(ij)属于 T_r，而(ik)属于 T_c．因此

$$A(jk)|Y_1^{[\nu]}\rangle=A(ik)(jk)(ij)|Y_1^{[\nu]}\rangle=A(ik)(jk)|Y_1^{[\nu]}\rangle=-A(jk)|Y_1^{[\nu]}\rangle,$$

这里利用了 $A(ik)=(ik)A=-A$．由上式可知

$$A(jk)|Y_1^{[\nu]}\rangle=0,$$

因而

$$AT_m|Y_1^{[\nu]}\rangle=0 \tag{4-24b}$$

由(4-24a)和(4-24b)得到

$$\lambda_n^{[\nu]}=\frac{1}{2}\sum_i\nu_i(\nu_i-1)-\frac{1}{2}\sum_i\mu_i(\mu_i-1) \tag{4-24c}$$

比较(4-22)和(4-24c)可知

$$n_s=\frac{1}{2}\sum_i\nu_i(\nu_i-1), \tag{4-24d}$$

$$n_a=\frac{1}{2}\sum_i\mu_i(\mu_i-1). \tag{4-24e}$$

n_a 又可改写成

$$n_a=\sum_{l=1}^{n}(\nu_l-\nu_{l+1})l(l-1)/2 \tag{4-24f}$$

代入到(4-24c)，得到

$$\lambda_n^{[\nu]}=\frac{1}{2}\sum_l\nu_l(\nu_l-2l+1). \tag{4-25}$$

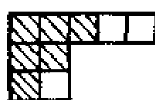
(4-24c)式给出了计算 $\lambda_n^{[\nu]}$ 的简便方法：认为[1]杨图同一行的各方格为对称，算出 n_s；认为同一列的各方格为反对称，算出 n_a，相减即得 $\lambda_n^{[\nu]}$．

---

1) 这仅仅是计算 λ_n 的一种简便方法，对杨盘的正确理解还是应按§4.3中所述的。

(2) 自轭表示$[\nu]=[\tilde{\nu}]$的杨图行列对称，所以它对应的λ_n必定为零.

因此在计算较复杂的杨图$[\nu]$的λ_n值时，可以把$[\nu]$中所包含的自轭图形对λ_n的贡献扣掉. 如左图中，阴影部分为一自轭图形，自轭图形的第一行增加了两个方块，增加的对称对数$n_s=3+4+1=8$. 自轭图形的第二列上增加了一个方块，增加的反对称对数$n_a=2$，所以S_9群[522]表示对应的$\lambda^{[522]}=8-2=6$.



(3) 由(4-3b)式知道，对应每一个基ψ_λ必定有一个基$\psi_{-\lambda}$，这里$-\lambda\equiv(-\lambda_n, -\lambda_{n-1}, \cdots-\lambda_2)$. 又因为$\pm\lambda_n$对应于$S_n$群的互为共轭表示，所以$\psi_\lambda$和$\psi_{-\lambda}$对应于互为转置的两个杨盘，即

$$(\nu m)=(\lambda_n\cdots\lambda_2), \quad (\tilde{\nu}\tilde{m})=(-\lambda_n\cdots-\lambda_2)\equiv(\tilde{\lambda}_m\cdots\tilde{\lambda}_2). \tag{4-26a}$$

例如

$$\psi_{3,2,2,3,1}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&5&6\\\hline\end{array}, \quad \psi_{-3,-2,-2,-3,-1}=\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2&5\\\hline 3&6\\\hline\end{array}. \tag{4-26b}$$

(4) ψ_λ是正交归一基

$$\langle\psi_\lambda|\psi_{\lambda'}\rangle=\delta_{\lambda\lambda'}, \tag{4-26c}$$
$$\delta_{\lambda\lambda'}=\delta_{\lambda_n\lambda'_n}\delta_{\lambda_{n-1}\lambda'_{n-1}}\cdots\delta_{\lambda_2\lambda'_2}.$$

也就是说λ和λ'中只要有一个量子数不同，它们就正交.

(5) 我们也可把$\lambda=(\lambda_n, \lambda_{n-1}, \cdots, \lambda_2)$看成一个$(n-1)$维矢量. 并定义：如果$\lambda$的头一个不为零的分量大于零，则称$\lambda$为正(记为$\lambda>0$)；若$\lambda-\lambda'>0$，则称$\lambda$大于$\lambda'$[1]. 这样定义后，$\lambda$从大到小的排列顺序就和§4.3规定的Yamanouchi数由大到小的顺序完全一致. 我们就按这种顺序将不可约基编码.

利用图4.5-3，我们可以将$n-1$个二循环类算符线性组合成一个算符

$$M=\sum_{f=2}^{n}k_f C(f), \tag{4-27a}$$

使得S_n群所有标准基$\psi_{\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n}$所对应的$M$的本征值

$$\lambda=\sum_{f=2}^{n}k_f\lambda_f \tag{4-27b}$$

全不相同. 于是我们就选(4-27a)式这样一个算符M作为S_n群的CSCO-II，以代替由$n-1$个算符组成的算符集(4-18)式，并用一个量子数λ代替$n-1$个量子数$(\lambda_n, \lambda_{n-1}, \cdots\lambda_2)$. 例如

$$M=\sum_{f=2}^{n}(f+7)C(f) \tag{4-27c}$$

为$S_n(n\leqslant6)$群的CSCO-II.

§4.6 求S_n群标准基的本征函数法(I)

前一节给出了S_n群的CSCO-II，因此求S_n的标准基就归结为解以下联立本征方程：

$$\begin{pmatrix}C(n)\\C(s)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}=\begin{pmatrix}\nu\\m\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)}, \tag{4-28a}$$
$$C(s)=(C(n-1), \cdots C(2)).$$

1) 这和李群中权矢量大小的定义是一致的.

或写成

$$C(f)\psi_m^{(\nu)}=\lambda_f\psi_m^{(\nu)},\quad f=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2. \tag{4-28b}$$

$$C(f)=\sum_{i>j=1}^{f}(ij).$$

$$\psi_m^{(\nu)}=\psi_\lambda,\quad \lambda=(\nu,\ m)=(\lambda_n,\ \lambda_{n-1},\ \cdots,\ \lambda_2).$$

(4-28b)式也可简写成

$$M\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda,\quad M=(C(n),\ C(n-1),\ \cdots C(2)). \tag{4-28c}$$

如果取(4-27a)式中的一个算符 M 作为 S_n 的 OSCO-II，则求 S_n 的标准基就归结为求一个算符 M 的本征函数问题

$$M\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda,\quad M=\sum_{f=2}^{n}k_fC(f). \tag{4-29}$$

换言之，这样就把原来 $n-1$ 个算符 $C(n)$, …, $C(2)$ 同时对角化的问题简化为只要把一个算符对角化的问题．必须指出，手算时(4-29)式反而比(4-28)式麻烦，但机器算时，用(4-29)式要方便得多．因为将一个矩阵对角化的算法要比将 $n-1$ 个矩阵同时对角化的算法简单得多，所需的内存数目也小得多．

本征方程 $M\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda$ 既可理解成(4-28)式，也可理解成(4-29)式．

由于 $C(2)$ 的本征方程特别容易求解，而且解了 $C(2)$ 的本征方程后可以使未知数几乎减少一半，因此具体计算时我们总是先解 $C(2)$ 的本征方程．然后分别在 $\lambda_2=1$ 和 $\lambda_2=-1$ 两个不同的子空间解 $C(3)$, …, $C(n)$ 的本征方程．于是只要将 $C(3)$, …, $C(n)$ 组合成一个算符

$$M'=\sum_{f=3}^{n}a_fC(f), \tag{4-30a}$$

使 M' 的本征值

$$\lambda=\sum_{f=3}^{n}a_f\lambda_f \tag{4-30b}$$

全不相同就行了．对 $n\leqslant 6$ 容易找到这样一种组合，例如

$$M'=\sum_{f=3}^{n}(2f-5)C(f),\quad \lambda=\sum_{f=3}^{n}(2f-5)\lambda_f \tag{4-31}$$

就满足上述要求．表 4.4-1 列出了由(4-31)式给出的 $\lambda_2=+1$ 的 Yamanouchi 基所对应的 λ 值(互为共轭基 $|Y_m^\nu\rangle$ 和 $|\widetilde{Y}_m^\nu\rangle$ 所对应的 λ 值刚好反号)．

例　求 $\alpha^3\beta$ 组态 S_4 的标准基

取态的编号为

$$\varphi_1=|\alpha\alpha\alpha\beta\rangle,\quad \varphi_2=|\alpha\alpha\beta\alpha\rangle,\quad \varphi_3=|\alpha\beta\alpha\alpha\rangle,\quad \varphi_4=|\beta\alpha\alpha\alpha\rangle. \tag{4-32a}$$

容易求得

$$C(4)=\begin{pmatrix}3&1&1&1\\1&3&1&1\\1&1&3&1\\1&1&1&3\end{pmatrix},\quad C(3)=\left(\begin{array}{c|ccc}3&&0&\\\hline &1&1&1\\0&1&1&1\\&1&1&1\end{array}\right),\quad C(2)=\left(\begin{array}{cc|cc}1&0&&\\0&1&&0\\\hline &&0&1\\&0&1&0\end{array}\right). \tag{4-32b}$$

利用前面介绍的消元法，将(4-32b)式三个矩阵同时对角化，就可求出 S_4 群的标准基：

$$\psi_{6,3,1}=\psi_{(21)}=\left|\ \boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}\boxed{4}\ \right\rangle=\frac{1}{2}(\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4),$$

$$\psi_{2,3,1}=\psi_{(9)}=\left|\ \begin{matrix}\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}\\ \boxed{4}\end{matrix}\ \right\rangle=\frac{1}{\sqrt{12}}(3\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3-\varphi_4),$$

$$\psi_{2,0,1}=\psi_{(6)}=\left|\ \begin{matrix}\boxed{1}\boxed{2}\boxed{4}\\ \boxed{3}\end{matrix}\ \right\rangle=\frac{1}{\sqrt{6}}(2\varphi_2-\varphi_3-\varphi_4), \tag{4-32c}$$

$$\psi_{2,0,-1}=\psi=\left|\ \begin{matrix}\boxed{1}\boxed{3}\boxed{4}\\ \boxed{2}\end{matrix}\ \right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_3-\varphi_4).$$

令 $\varphi_i=\boldsymbol{r}_i$, (4-32c)就是 Jacobi 坐标. 也可以将(4-31)式一个算符 M' 在 $\lambda_2=\pm1$ 的子空间对角化来求出 IR 基. (4-32a)式的四维空间可分解成以下两个子空间

$$\begin{aligned}&\lambda_2=1, \quad \phi_1=\varphi_1, \quad \phi_2=\varphi_2, \quad \phi_3=\varphi_3+\varphi_4,\\ &\lambda_2=-1, \quad \phi=\varphi_3-\varphi_4.\end{aligned} \tag{4-32d}$$

这里为了方便(避免引进无理数)用了非归一基. $\lambda_2=-1$ 已经是一维空间了. 因此只需将算符

$$M'=C(3)+3C(4) \tag{4-33}$$

在 $\lambda_2=1$ 的子空间上对角化就够了. M' 的矩阵元可表为(利用(2-110b)和(2-139)式):

$$M'_{ij}=\langle\bar{\phi}_i|M'|\phi_j\rangle=\langle\phi_i|M'|\phi_j\rangle/\langle\phi_i|\phi_i\rangle. \tag{4-34}$$

由于用了非归一基, M'_{ij} 不再等于 M'_{ji}. 由(4-32b)式、(4-32d)式和(4-33)可算得

$$M'=\begin{pmatrix}3&0&0\\0&1&2\\0&1&2\end{pmatrix}+3\begin{pmatrix}3&1&2\\1&3&2\\1&1&4\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}12&3&6\\3&10&8\\3&4&14\end{pmatrix}.$$

由此可解得 M' 的三个本征矢量(1, 1, 1), (3, −1, −1), (0, 2, −1)对应于本征值 21, 9, 6. 由对照表 4.4-1 可写出对应的杨图. 最后所得的结果仍然是(4-32c)式.

§3.13 指出可利用已知的群 G 生成元的不可约矩阵来简化求不可约基的本征函数法. 因为置换群 S_n 的生成元的标准矩阵已由(4-14b)式给出. 故§3.13 方法可用于置换群. 本节介绍的方法没有用内禀量子数. 关于用内禀量子数来区分同一 IR 出现不止一次的情形, 见§4.9 方法(II).

由(4-17)式和(4-14)式得

$$\begin{aligned}&|Y^{[\nu]}_{m'}\rangle=[(T-D^{[\nu]}_{mm}(T))/D^{[\nu]}_{m'm}(T)]\,|Y^{[\nu]}_{m}\rangle,\\ &Y^{[\nu]}_{m'}=TY^{[\nu]}_{m}, \quad T=(i-1,\ i), \quad i=2,\ 3,\ \cdots n.\end{aligned} \tag{4-35}$$

$D^{[\nu]}_{m'm}(T)$ 由(4-14)式给出. 和(3-253)式比较, 知道

$$F^{(\nu)}_{m'm}=(T-D^{(\nu)}_{mm}(T))/D^{(\nu)}_{m'm}(T). \tag{4-36a}$$

因此只要从(4-29)式或(4-28)式解出某一个不可约表示的某一个分量, 例如第 τ 个 $IR(\nu)$ 的第 m 个分量 $\psi^{(\nu)\tau}_{m}$, 然后逐步选择合适的相邻对换算符 T, 利用 Yamanouchi 标准矩阵元(4-14)式或表 4.4-2, 就可利用下式求出该不可约表示的所有其余分量

$$\psi^{(\nu)\tau}_{m'}=F^{(\nu)}_{m'm}\psi^{(\nu)\tau}_{m}. \tag{4-36b}$$

这样做既节省了解方程的时间, 又保证了相对位相满足 Yamanouchi 位相约定. 例如, 对

S_5 群的[32]表示,若已知第一分量的解 $\left|\begin{matrix}123\\45\end{matrix}\right\rangle$, 按以下方式, 利用相邻置换可得出所有其余分量:

$$\left|\begin{matrix}123\\45\end{matrix}\right\rangle \xrightarrow{(34)} \left|\begin{matrix}124\\35\end{matrix}\right\rangle \xrightarrow{(23)} \left|\begin{matrix}134\\25\end{matrix}\right\rangle \xrightarrow{(45)} \left|\begin{matrix}135\\24\end{matrix}\right\rangle$$

$$\left|\begin{matrix}124\\35\end{matrix}\right\rangle \xrightarrow{(45)} \left|\begin{matrix}125\\34\end{matrix}\right\rangle$$

根据上面讨论,我们可将求置换群标准基的本征函数法归纳成以下几个步骤:

(1) 对于 n 个粒子体系的一个给定组态 $(\alpha)^{n_1}(\beta)^{n_2}(\gamma)^{n_3}\cdots\cdots$ 写出所有可能的 n 粒子乘积态 φ_a, $a=1, 2, \cdots, N$. 这里 $\alpha, \beta, \gamma, \cdots$ 代表一个物理体系的单粒子态, N 为该组态下单粒子乘积态的总数

$$N=\frac{n!}{n_1!n_2!n_3!\cdots}. \tag{4-37}$$

(2) 令待求的标准基为 $\psi_\lambda=\sum_a u_{\lambda a}\varphi_a$. 则 N 个未知数 $u_{\lambda a}$ 满足联立线性齐次方程组

$$\sum_b(\langle\varphi_a|C(f)|\varphi_b\rangle-\lambda_f\delta_{ab})u_{\lambda b}=0, \tag{4-38}$$

$$a=1, 2, \cdots, N, \quad f=n, n-1, \cdots, 2.$$

利用

$$C(f)=C(f-1)+\sum_{i=1}^{f-1}p_{if}, \tag{4-39}$$

(4-38)式可简化为

$$\sum_b\left[\sum_{i=1}^{f-1}\langle\varphi_a|p_{if}|\varphi_b\rangle-(\lambda_f-\lambda_{f-1})\delta_{ab}\right]u_{\lambda b}=0, \ f=2, 3, \cdots, n. \tag{4-40}$$

这里约定 $\lambda_1\equiv0$.

(3) 根据分支律图,任取一组合适的 $(\lambda_2, \lambda_3, \cdots)$ 值,代入方程(4-40)式,按 $f=2, 3, \cdots$ 的次序逐步解方程(4-40)式, 可使后一级的方程中的未知数的个数迅速减少. 这样就避免了解高阶线性方程的麻烦.

(4) 若本征值 $\lambda=(\nu, m)$ 没有简并,则由(4-40)式可解出一个标准基 $\psi_m^{(\nu)}$. 如果它为 τ 重简并,则可任意定出 τ 个互相正交的解 $\psi_m^{(\nu)1}, \cdots, \psi_m^{(\nu)\tau}$.

(5) 由(4-36)式可求出所有其余分量的解.

例 求 $\alpha^2\beta\gamma$ 组态 S_4 群不可约基.

该组态共有 12 个单粒子乘积态, 见表 4.6-1 第一列, 其编号见该表第二列. 我们先作出 $C(2)=(12)$ 对这 12 个基的作用,结果列在表 4.6-1 的第三列.

由于我们只需找每个 IR 的某一分量解,而除全反对称(全对称)表示外, S_n 群任一 IR 都有 $\lambda_2=1(-1)$ 的基, 所以 λ_2 可随便取某一值, 我们取 $\lambda_2=-1$. 由表 4.6-1 第二、三列立即得到

$$\lambda_2=-1; \ u_2=-u_3, \ u_4=-u_5, \ u_7=-u_9, \ u_{10}=-u_8, \ u_{11}=-u_{12}; \ u_1, u_6 \text{ 未定} \tag{4-41}$$

于是, 12 个未知数减少到 7 个,可以从中任选出 7 个作为独立变量,例如可取 $u_1, u_2, u_4, u_6, u_7, u_{10}, u_{11}$. 下面再利用 $C(3)$ 的本征方程. 由(3-75b)式可知这只需作出(13)和(23)置换对 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_4, \varphi_6, \varphi_7, \varphi_{10}, \varphi_{11}$ 的作用,结果仍列在表 4.6-1. 利用(3-75b)式, 立刻可写下 $C(3)$ 的本征方程. 例如由表 4.6-1 第 1, 2, 4, 6 行得到

表 4.6-1

φ_a	t (ij) / a	(12)	(13)	(23)	(14)	(24)	(34)
$\vert\alpha\alpha\beta\gamma\rangle$	1	1	2	3			6
$\vert\beta\alpha\alpha\gamma\rangle$	2	3	1	4	7	11	8
$\vert\alpha\beta\alpha\gamma\rangle$	3	2		1			10
$\vert\gamma\alpha\beta\alpha\rangle$	4	5	8	12	1	4	7
$\vert\alpha\gamma\beta\alpha\rangle$	5	4		10			9
$\vert\alpha\alpha\gamma\beta\rangle$	6	6	7	9			1
$\vert\gamma\alpha\alpha\beta\rangle$	7	9	6	7	2	12	4
$\vert\beta\alpha\gamma\alpha\rangle$	8	10		11			2
$\vert\alpha\gamma\beta\alpha\rangle$	9	7		6			5
$\vert\alpha\beta\gamma\alpha\rangle$	10	8	12	5	10	6	3
$\vert\beta\gamma\alpha\alpha\rangle$	11	12	5	8			11
$\vert\gamma\beta\alpha\alpha\rangle$	12	11		4			12

① $(ij)\varphi_a=\varphi_b$.

② 表中空白处代表该处数值不必写出，求解时不需要。

$$u_1+u_2+u_3=\lambda_3 u_1,\quad u_3+u_1+u_2=\lambda_3 u_2,$$
$$u_5+u_8+u_{12}=\lambda_3 u_4,\quad u_6+u_7+u_9=\lambda_3 u_6. \tag{4-42a}$$

从图 4.5-3 可知，除全对称和全反对称表示外，S_n 群的任一 IR 都有 $\lambda_3=0$ 的分量，因此令(4-42a)式中 $\lambda_3=0$，立刻看出只有三个独立方程

$$u_1+u_2+u_3=0,\quad u_5+u_8+u_{12}=0,\quad u_6+u_7+u_9=0. \tag{4-42b}$$

容易看出表 4.6-1 的另外几行(7, 10, 11 行)不给出新的方程．结合(4-41)式得到

$$u_1=u_6=0,\quad u_{12}=u_4+u_{10}. \tag{4-43}$$

于是 7 个独立变数又减少到 4 个，选为 u_2, u_4, u_7, u_{10}.

下面再利用 $C(4)$ 的本征方程．为此求出(14)，(24)，(34)置换对 $\varphi_2, \varphi_4, \varphi_7, \varphi_{10}$ 的作用，结果见表 4.6-1．由(4-40)式及表 4.6-1 第 2, 4, 7, 10 行得到 $C(4)$ 的本征方程(注意 $\lambda_3=0$)：

$$\begin{aligned}
u_7+u_{11}+u_8&=-u_4+u_7-2u_{10}=\lambda_4 u_2,\\
u_1+u_4+u_7&=u_4+u_7=\lambda_4 u_4,\\
u_2+u_{12}+u_4&=u_2+2u_4+u_{10}=\lambda_4 u_7,\\
u_{10}+u_6+u_3&=-u_2+u_{10}=\lambda_4 u_{10}.
\end{aligned} \tag{4-44}$$

这里利用了(4-41)式和(4-43)式．本征值 λ_4 由下式给出[1)]

$$\begin{vmatrix} -\lambda_4 & -1 & 1 & -2 \\ 0 & 1-\lambda_4 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -\lambda_4 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 1-\lambda_4 \end{vmatrix} =\lambda_4(\lambda_4-2)^2(\lambda_4+2)=0. \tag{4-45}$$

由此可知 $\lambda_4=0$([22]表示)和 $\lambda_4=-2$([211]表示)，各出现一次，而 $\lambda_4=2$([31]表示)出现两次．下面对以上情况分别求解．

1) §4.9 将介绍一种不需解此特征方程而直接得到本征值 λ_4 的方法。

(i) $\lambda_4=0$

将 $\lambda_4=0$，代入(4-44)式可求得 u_2, u_4, u_7, u_{10} 之比．再由(4-41)式和(4-43)式得到[1]

$$\psi^{(0)}_{0,-1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta&\gamma\\\hline\end{array}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{8}}[\varphi_3+\varphi_4+\varphi_8+\varphi_9-\varphi_2-\varphi_5-\varphi_7-\varphi_{10}]. \quad (4\text{-}46a)$$

利用表 4.4-2[22] 表示矩阵元，由(4-36)式及表 4.6-1 第 5 列得[2]

$$\psi^{(0)}_{0,1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta&\gamma\\\hline\end{array}\right\rangle=[(23)-D^{[22]}_{22}(23)]\psi^{(0)}_{0,-1}/D^{[22]}_{12}(23)=\left[(23)-\frac{1}{2}\right]\psi^{(0)}_{0,-1}\Big/\frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{24}}[2(\varphi_1+\varphi_6+\varphi_{11}+\varphi_{12})-(\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5+\varphi_7+\varphi_8+\varphi_9+\varphi_{10})]. \quad (4\text{-}46b)$$

(ii) $\lambda_4=-2$；将 $\lambda_4=-2$ 代入(4-44)式类似地可求得

$$\psi^{(-2)}_{0,-1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta\\\cline{1-1} \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{48}}[3(\varphi_3-\varphi_2+\varphi_7-\varphi_9)+2(\varphi_{11}-\varphi_{12})-\varphi_4+\varphi_5+\varphi_8-\varphi_{10}],$$

$$\psi^{(-2)}_{0,1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta\\\cline{1-1} \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=[(23)-D^{[211]}_{22}(23)]\psi^{(-2)}_{0,-1}/D^{[211]}_{12}(23)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{16}}[2(\varphi_1-\varphi_6)-(\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4+\varphi_5)+(\varphi_7+\varphi_8+\varphi_9+\varphi_{10})]. \quad (4\text{-}47)$$

$$\psi^{(-2)}_{-3-1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta\\\cline{1-1} \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=[(34)-D^{[211]}_{22}(34)]\psi^{(-2)}_{0,-1}/D^{[211]}_{32}(34)$$

$$=\sqrt{\frac{1}{6}}(\varphi_4+\varphi_{10}+\varphi_{11}-\varphi_5-\varphi_8-\varphi_{12}).$$

(iii) $\lambda_4=2$

$\lambda_4=2$ 为二重根，代入(4-44)式，只得到两个独立方程

$$u_4=u_7,\qquad u_2=-u_{10}. \quad (4\text{-}48)$$

可以得到两个线性独立解，解不唯一．例如可令 $u_2=0$, $u_4=1$，得到一个解

$$\psi'^{(2)\tau}_{0,-1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{6}}(-\varphi_4+\varphi_5-\varphi_7+\varphi_9+\varphi_{11}-\varphi_{12}). \quad (4\text{-}49a)$$

再令 $u_2=1$, $u_4=0$．得到另一个解

$$\psi'^{(2)\theta}_{0,-1}=\sqrt{\frac{1}{6}}(\varphi_2-\varphi_3+\varphi_8-\varphi_{10}+\varphi_{11}-\varphi_{12}). \quad (4\text{-}49b)$$

这两个解并不正交，利用正交化手续可得到和 $\psi^{(2)\tau}_{0,-1}$ 正交的解为：

$$\psi^{(2)\theta}_{0,-1}=\left|\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=N[\psi'^{(2)\theta}-\langle\psi^{(2)\tau}|\psi'^{(2)\theta}\rangle\psi^{(2)\tau}]$$

$$=\sqrt{\frac{1}{48}}[3(-\varphi_2+\varphi_3-\varphi_8+\varphi_{10})-2(\varphi_{11}-\varphi_{12})+(-\varphi_4+\varphi_5-\varphi_7+\varphi_9)]. \quad (4\text{-}49c)$$

---

1) 关于 Weyl 盘的意义见 § 4.8.

2) 注意(23)置换不是将 $\varphi_2\rightarrow\varphi_3$.

这里 N 为归一系数, N 右边的方括号内省略了分量指标.

由(4-36)式及表 4.4-2[31]表示矩阵元,可得出其余四个解

$$\psi_{3,1}^{(2)\gamma}=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{1}{6}[3(\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3)$$

$$-\varphi_4-\varphi_5-\varphi_6-\varphi_7-\varphi_8-\varphi_9-\varphi_{10}-\varphi_{11}-\varphi_{12}].$$

$$\psi_{3,1}^{(2)\theta}=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{18}}[2(\varphi_6+\varphi_7+\varphi_9)-\varphi_4-\varphi_5-\varphi_8-\varphi_{10}-\varphi_{11}-\varphi_{12}].$$

$$\psi_{0,1}^{(2)\gamma}=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{18}}[2(\varphi_6+\varphi_8+\varphi_{10})-\varphi_4-\varphi_5-\varphi_7-\varphi_9-\varphi_{11}-\varphi_{12}].$$

$$\psi_{0,1}^{(2)\theta}=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{1}{12}[3(2\varphi_1-\varphi_2-\varphi_3)-4(\varphi_{11}+\varphi_{12})$$

$$+5(\varphi_4+\varphi_5)+2\varphi_6-\varphi_7-\varphi_8-\varphi_9-\varphi_{10}]. \tag{4-49d}$$

前面一共得到了 11 个不可约基, 原来共有 12 个不可约基, 因此剩下一个不可约基还未求出. 根据前面分析,这个不可约基一定是全对称表示,因此根本不必解方程可立即写出来

$$\psi_{3,1}^{(6)}=\left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline\end{array}\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{12}}\sum_{a=1}^{12}\varphi_a. \tag{4-50}$$

如果令 α 态波函数为常数, β 态、γ 态分别和 x, y 成正比,则由(4-46)式和(4-47)式得

$$\psi_{0,1}^{(0)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}\right\rangle=[2x_1y_2+2x_3y_4-(x_1+x_2)(y_3+y_4)]+[x\leftrightarrow y],$$

$$\psi_{0,-1}^{(0)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array}\right\rangle=[(x_1-x_2)(y_3-y_4)]+[x\leftrightarrow y],$$

$$\psi_{0,1}^{(-2)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=[(x_1+x_2)y_3-(x_1+x_2-2x_3)y_4]-[x\leftrightarrow y], \tag{4-51}$$

$$\psi_{0,-1}^{(-2)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=[(x_1-x_2)(y_3-3y_4)+2x_1y_2]-[x\leftrightarrow y],$$

$$\psi_{-3,-1}^{(-2)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\begin{vmatrix}x_1&y_1&1\\x_2&y_2&1\\x_3&y_3&1\end{vmatrix}.$$

这里 $[x\leftrightarrow y]$ 代表将前一项中 x 和 y 互换. x 和 y 的下标为粒子编码.

顺便指出, 本征函数法不但提供了一种求群 G IR 基的简便办法,而且也附带给我们提供了一个非常简单的判别法用以判断某一波函数是否属群 G 的某一 IR, 这只需检验一下它是不是第一类完备算符集的本征函数, 而按传统理论来判别则是相当麻烦的. 例如我们来检验以下两个波函数是否属 S_4 群的 (-2) (或[211])表示?

$$\psi_{0,1}^{(-2)}=\psi_1^{[211]}=(x_1+x_2-2x_3)y_4-(y_1+y_2-2y_3)x_4$$

$$\psi_{0,-1}^{(-2)}=\psi_2^{[211]}=(x_1-x_2)y_4-(y_1-y_2)x_4.$$

这两个波函数取自 Bohr 和 Mottelson (1969) IC. 将 $C(4)=\sum_{i<j}^{4}p_{ij}$ 作用到上式很快得到

$$C(4)\psi_i^{[211]}\neq \text{Const}\times\psi_i^{[211]},\quad i=1,\ 2.$$

于是可以断定 Bohr 书上给的[211]表示的这两个基错了. 正确的结果为(4-51)式.

§4.7 置换群的 CSCO-III

1. CSCO-III

根据§3.8和§4.5的讨论可知, 置换群 S_n 的 CSCO-III 由 $(2n-3)$ 个二循环类算符组成:

$$K=(C(n);\ C(n-1),\ C(n-2),\ \cdots C(2);\ \bar{C}(n-1),\ \bar{C}(n-2),\ \cdots\bar{C}(2)),\quad (4\text{-}52\text{a})$$

式中 $\bar{C}(f)$ 为内禀置换群 $\bar{S}(f)$ 的二循环类算符.

如果在 n-粒子乘积态空间, 则由于(3-115b)式, 取以下形式的 CSCO-III 更为方便

$$K=(C(n);C(n-1),\ C(n-2),\ \cdots,\ C(2);\mathscr{C}(n-1),\ \mathscr{C}(n-2),\ \cdots\mathscr{C}(2)),\quad (4\text{-}52\text{b})$$

式中 $\mathscr{C}(f)$ 为态置换群 $\mathscr{S}_f$ 的二循环类算符.

S_n 群的正则表示分解问题归结为解 K 的联立本征方程

$$\psi_m^{(\nu)k}=\sum_{a=1}^{n!}u_{\nu mk,a}\varphi_a,\quad (4\text{-}53\text{a})$$

$$\begin{pmatrix}C(n)\\ C(s)\\ \bar{C}(s)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)k}=\begin{pmatrix}\nu\\ m\\ k\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)k},\quad (4\text{-}53\text{b})$$

$$C(s)=(C(n-1),\ C(n-2),\ \cdots C(2));\quad \bar{C}(s)=(\bar{C}(n-1),\ \bar{C}(n-2),\ \cdots,\ \bar{C}(2)),$$
$$\nu=\lambda_n;\quad m=(\lambda_{n-1},\ \lambda_{n-2},\ \cdots,\ \lambda_2);\quad k=(\bar{\lambda}_{n-1},\ \bar{\lambda}_{n-2},\ \cdots,\ \bar{\lambda}_2).$$

将(4-53a)代入(4-53b), 得到 $u_{\nu mk,a}$ 满足的本征方程

$$\sum_b K_{ab}u_{\lambda b}=\lambda u_{\lambda a}\quad (4\text{-}53\text{c})$$

$$K_{ab}=\langle\varphi_a|K|\varphi_b\rangle,\quad \lambda=(\nu,\ m,\ k).$$

类似于 (4-29) 式把 $(n-1)$ 个二循环类算符组合成一个算符 M, 使它构成 S_n 的 CSCO-II, 我们可把 $(2n-3)$ 个二循环类算符组合成一个算符 K, 使它构成 S_n 群的 CSCO-III

$$K=\sum_{f=2}^{n}a_fC(f)+\sum_{f=2}^{n-1}\bar{a}_f\bar{C}(f).\quad (4\text{-}54)$$

于是把 $(2n-3)$ 个算符同时对角化的问题[(4-53)式]就简化为把 (4-54)式一个算符 K 对角化的问题. 因此(4-53c)中的 K 既可理解为(4-52)式的 $(2n-3)$ 个算符, 也可理解为(4-54)式的一个算符.

例如, S_3 群的 CSCO-III 可选为

$$K=3C(3)+2C(2)+\bar{C}(2),\quad (4\text{-}55)$$

它有6个不同的本征值 12, 3, -1, 1, -3, -12 分别对应 $(\nu,\ m,\ k)=(3,\ 1,\ 1)$, $(0,1,1)$, $(0,1,-1)$, $(0,\ -1,\ 1)$, $(0,\ -1,\ -1)$, $(-3,\ -1,\ -1)$. 由(4-55a), (3-96) 和 (3-136) 式得 K 的正则表示矩阵为

$$K=\left(\begin{array}{cc:cc:cc}0&6&3&3&0&0\\6&0&0&0&3&3\\ \hdashline 3&0&&&4&5\\3&0&\multicolumn{2}{c:}{0}&5&4\\ \hdashline 0&3&4&5&&\\0&3&5&4&\multicolumn{2}{c}{0}\end{array}\right). \tag{4-56}$$

将它对角化即得到解(3-119)式. 显然这种算法的优点仅限于机器计算, 手算反而比解(4-53b)式麻烦.

2. 标志标准基的几种等价方法

S_n 群正则表示分解得到的 S_n 群和 $\bar{S}_n$(或 $\mathscr{S}_n$)群的标准基 $\psi_m^{(\nu)k}$, 可用$(2n-3)$个量子数唯一标志. 这些量子数分成两套:

$$(\nu,\ m)=(\lambda_n;\ \lambda_{n-1},\ \lambda_{n-2},\ \cdots,\ \lambda_2)$$

标志不可约基在 S_n 群作用下的变换性质;

$$(\nu,\ \overline{m})=(\nu,\ k)=(\lambda_n;\ \bar{\lambda}_{n-1},\ \bar{\lambda}_{n-2},\ \cdots,\ \bar{\lambda}_2)$$

标志不可约基在 $\bar{S}_n$ 群元下的变换性质.

§4.5 已证明, 量子数$(\nu,\ m)$和 Yamanouchi 数$(r_n,\ r_{n-1},\ \cdots,\ r_2)$以及杨盘 $Y_m^{[\nu]}$ 是一一对应的. 显然我们也可让$(\nu,\ k)$和另一 Yamanouchi 数$(\bar{r}_n,\ \bar{r}_{n-1},\ \cdots,\ \bar{r}_2)$或另一杨盘 $Y_k^{[\nu]}$ 相对应. 于是可用三种互相等价的方法标志 S_n 正则表示分解产生的不可约基:

(1) 两套量子数 $\psi_m^{[\nu]k}$.

(2) 两套 Yamanouchi 数 $\psi(r_n,\ r_{n-1},\ \cdots,\ r_2;\ \bar{r}_n,\ \bar{r}_{n-1},\ \cdots,\ \bar{r}_2)$.

(3) 两个杨盘 $|Y_m^{(\nu)},\ Y_k^{(\nu)}\rangle$.

由于内禀置换群标准基就是态置换群标准基, 我们可用 Weyl 盘来标志后者, 将杨盘 $Y_k^{(\nu)}$ 中的号码 a 换成 $i_a(a=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$就得到 $W_k^{(\nu)}$. $\mathscr{S}_n$ 群标准基 $|W_k^{(\nu)}\rangle$的性质和 $\bar{S}_n$ 群标准基 $|Y_k^{(\nu)}\rangle$一样. 例如若相邻态指标处在同一行(列), 则标准基 $|W_k^{(\nu)}\rangle$对这些态指标为对称(反对称). 例如, 若取 $i_1=\alpha,\ i_2=\beta,\ i_3=\gamma,\ i_4=\delta$, 则 $\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$对 $\alpha,\ \beta,\ \gamma$ 为对称; $\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$对 $\alpha,\ \beta$ 为反对称, 对 $\gamma,\ \delta$ 为对称, 而对 $\alpha,\ \gamma$ 以及 $\beta,\ \gamma$ 则没有什么对称性, 等等. 于是第 4 种等价的标志方法为

(4) 一个杨盘, 一个 Weyl 盘 $|Y_m^{(\nu)},\ W_k^{(\nu)}\rangle$.

3. 位相规则和主项

为了使本征方程给出的解 $\psi_m^{(\nu)k}$ 和 Yamanouchi 标准基包括位相在内完全一致, 下面我们来讨论本征矢 $\psi_m^{(\nu)k}$ 的位相选择规则.

令 R_{mk} 代表一置换算符, 它将杨盘 Y_k 转到 Y_m, 即

$$Y_m=R_{mk}Y_k. \tag{4-57}$$

R_{mk} 必可表成相邻对换算符的乘积

$$R_{mk}=T_\alpha T_\beta\cdots T_\delta. \tag{4-58}$$

由(4-17)式和(4-58)式得

$$D_{mk}^{(\nu)}(R_{mk})=\sum_{st\cdots u}D_{ms}^{(\nu)}(T_\alpha)D_{st}^{(\nu)}(T_\beta)\cdots D_{uk}^{(\nu)}(T_\delta)$$

$$=D_{mi}^{(\nu)}(T_\alpha)D_{ij}^{(\nu)}(T_\beta)\cdots D_{lk}^{(\nu)}(T_\delta)>0\text{[1]}, \tag{4-59a}$$

式中 $\qquad Y_l=T_\delta Y_k,\ \cdots,\quad Y_i=T_\beta Y_j,\quad Y_m=T_\alpha Y_i.$

这里最后一步利用了位相约定(4-14b)，于是

$$D_{mk}^{(\nu)}(R_{mk})>0. \tag{4-59b}$$

(4-59b)式就是我们决定位相的准则．从本征方程(4-53c)式解得了 $u_{\nu mk,a}=\sqrt{\dfrac{h_\nu}{g}}D_{mk}^{(\nu)}(R_a)$. 根据量子数$(\nu m)$和$(\nu k)$，可定出 Y_m 和 Y_k．显然，S_n 群中必有一个也只有一个置换算符 $R_{a_0}=R_{mk}$ 满足(4-57)式，调节总位相使得这一项 $u_{\nu mk,a_0}$ 大于零，这种项我们称为主项．表 4.9 中带方框的数字即为主项系数．

当用 n 粒子乘积波函数作为可约基时，容易根据杨盘 $Y_m^{(\nu)}$ 和 Weyl 盘 $W_k^{(\nu)}$ 定出 $\psi_m^{(\nu)k}=\sum_a u_{\nu mk,a}\varphi_a$ 中，系数永远大于零的主项

$$\varphi_{a_0}=R_{mk}\Phi_0. \tag{4-60a}$$

这只需按 Y_m^ν 中所指定的自然数顺序依次写下 W_k^ν 中相应的态指标，将这 n 个态指标依次放在一起，并加上狄喇克括号就是主项 φ_{a_0}．例如对标准基

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&5&\\\cline{1-2} 6&&\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\varphi\\\hline \beta&\delta&\\\cline{1-2} \varepsilon&&\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle,\ \text{其主项为}\ \varphi_{a_0}=|\alpha\gamma\beta\varphi\delta\varepsilon\rangle. \tag{4-60b}$$

可以证明，以上由 Y_m^ν 和 W_k^ν 定主项 φ_{a_0} 的方法也适用于 Weyl 盘中有相同的单粒子态的情形．见表 4.9．不难验证，前面求出的 S_3 群和 S_4 群所有的标准基都满足上述位相规则．

4．共轭表示的基和矩阵元

由于 CSCO-III K 中任一算符都为二循环类算符，故 K 的置换宇称为负，因此

$$K_{ab}=0,\quad 当\ \delta_a\delta_b\neq-1\ 时. \tag{4-61}$$

由(4-53c)式和(4-61)式立即得到

$$\sum_{b=1}^{g}K_{ab}(\delta_b u_{\lambda b})=(-\lambda)(\delta_a u_{\lambda a}). \tag{4-62}$$

上式表明，若$\{u_{\lambda a}\}$为对应于本征值 λ 的解，则必存在一个 $-\lambda$ 的解

$$u_{-\lambda a}=\pm\delta_a u_{\lambda a}. \tag{4-63}$$

ψ_λ 和 $\psi_{-\lambda}$ 称为互为共轭基．由 § 4.5 知，若

$$\psi_\lambda=\psi_m^{(\nu)k}=|Y_m^\nu,\ Y_k^\nu\rangle=\sum_a u_{\lambda a}\varphi_a, \tag{4-64a}$$

则

$$\psi_{-\lambda}\equiv\psi_{\tilde m}^{(\tilde\nu)\tilde k}=|\widetilde{Y}_m^\nu,\ \widetilde{Y}_k^\nu\rangle=\sum_a u_{-\lambda a}\varphi_a. \tag{4-64b}$$

这里 $-\lambda=(-\nu,\ -m,\ -k)=(\tilde\nu,\ \tilde m,\ \tilde k)$；$\widetilde{Y}_m^\nu\equiv Y_{\tilde m}^{\tilde\nu}$，$\widetilde{Y}_k^\nu\equiv Y_{\tilde k}^{\tilde\nu}$ 分别为杨盘 Y_m^ν 和 Y_k^ν 的行列

1) 注意这儿已没有求和号了．因为由(4-14b)式知当 $Y_m^{(\nu)}\neq T_\beta Y_j^{(\nu)}$ 时，$D_{mj}^{(\nu)}(T_\beta)=0$．例如$[\nu]=[31]$，$m=1$，$k=3$．亦即 $Y_1^{[31]}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4&&\\\cline{1-1}\end{array}$，$Y_3^{[31]}=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2&&\\\cline{1-1}\end{array}$，$R_{mk}=(243)=(34)(23)$．这时 $D_{13}^{[31]}(243)=D_{12}^{[31]}(34)D_{23}^{[31]}(23)$．上式中右方照理还应有 $D_{11}^{[31]}(34)D_{13}^{[31]}(23)+D_{13}^{[31]}(34)D_{33}^{[31]}(23)$两项，但由(4-14b)式知 $D_{13}^{[31]}(23)=D_{13}^{[31]}(34)=0$，所以以上两项贡献为零．

转置.

(4-63)式中究竟取正号或负号决定于位相约定. 我们已按置换群标准表示选取位相, 即要求主项 $u_{\lambda a_0}$ 永远大于零, 而 ψ_λ 和 $\psi_{-\lambda}$ 具有相同的主项(因为由(4-57)式得 $\widetilde{Y}_m=R_{mk}\widetilde{Y}_k$, 所以 R_{mk} 也是 $\psi_{-\lambda}$ 的主项). 于是有

$$u_{-\lambda a}=\delta_{a_0}\delta_a u_{\lambda a}. \tag{4-65}$$

由 $D^{(\nu)}_{mk}(R_a)=\sqrt{\dfrac{g}{h_\nu}}\,u_{\nu mk,a}$ [(3-200)式, 注意现在 u 为实数] 上式又可改写成

$$D^{(-\nu)}_{-m-k}(R_a)=\delta_{a_0}\delta_a D^{(\nu)}_{mk}(R_a), \qquad R_{a_0}=R_{mk}. \tag{4-66a}$$

对应每一个杨盘 $Y^{(\nu)}_m$, 可定义一个位相因子 $\Lambda^\nu_m=\pm1$, 正负取决于从 $Y^{(\nu)}_1$(即 Yamanouchi 数最大的一个盘)得到 $Y^{(\nu)}_m$ 用的是偶置换还是奇置换, S_6 以内 Λ^ν_m 表见表 4.4-1. 置换算符 $R_{a_0}=R_{mk}$ 的宇称 δ_{a_0} 可用位相因子 Λ^ν_m, Λ^ν_k 表示出来, 由(4-57)式得

$$\delta_{a_0}=\Lambda^\nu_m\Lambda^\nu_k. \tag{4-66b}$$

由(4-66)式我们得到 $IR(\nu)$ 和共轭表示 $(\widetilde{\nu})$ 的矩阵元之间的一个重要关系式

$$D^{(\widetilde{\nu})}_{\widetilde{m}\widetilde{k}}(R_a)=\delta_a\Lambda^\nu_m\Lambda^\nu_k D^{(\nu)}_{mk}(R_a)^{1)}, \tag{4-67}$$

5. 对称化算子和反对称化算子

S_n 群的 CSCO-III 在群空间的本征矢量 $P^{[\nu]k}_m$ 又称为正交单位(orthogonal unit), 在 Rutherford 书上记为 $O^{[\nu]}_{mk}$. 即

$$P^{[\nu]k}_m=O^{[\nu]}_{mk}=\frac{h_\nu}{n!}\sum_a D^{[\nu]}_{mk}(p_a)p_a. \tag{4-68a}$$

$P^{[n]}$ 和 $P^{[1^n]}$ 分别称为对称化算子和反对称化算子, 记为 $\mathscr{S}$ 和 $\mathscr{A}$. 即

$$\mathscr{S}=\frac{1}{n!}\sum_{a=1}^{n!}p_a, \qquad \mathscr{A}=\frac{1}{n!}\sum_{a=1}^{n!}\delta_a p_a. \tag{4-68b}$$

§4.8 置换群亚标准基

1. 态置换群(态指标有重复情形)

上面讨论的是 n 个单粒子态全不相同的情形. 物理应用中经常碰到的是单粒子态有重复的情形. 例如有 l 个单粒子态 $m_1m_2\cdots m_l$, 有 n 个粒子处在某一组态 $(m_1)^{n_1}(m_2)^{n_2}\cdots(m_l)^{n_l}$, $\sum\limits_i n_i=n$. 为了在态指标有重复时定义态置换群, 我们先把单粒子态进行编号, 令

$$i_1=\cdots=i_{n_1}=m_1,\ i_{n_1+1}=\cdots=i_{n_1+n_2}=m_2,\ \cdots,\ i_{n-n_l+1}=\cdots=i_n=m_l. \tag{4-69a}$$

即 $1\cdots n_1$ 号对应于 m_1, $n_1+1\cdots n_1+n_2$ 号对应于 m_2, $\cdots$, $n-n_l+1\cdots n$ 号对应于 m_l. 然后和态指标没有重复时的情形一样, 定义态置换群 $\mathscr{S}_n$ 的置换算符 $\mathscr{P}_{ab}$ 为置换 i 的下标,

$$\mathscr{P}_{ab}|\cdots i_a\cdots i_b\cdots\rangle=|\cdots i_b\cdots i_a\cdots\rangle. \tag{4-69b}$$

在态指标没有重复时, 一个态指标 i_a 只对应一个单粒子态 m_a, 因此在所有的 $n!$ 个可约基 $\{\mathscr{P}_a|i_1i_2\cdots i_n\rangle\}$ $(a=1,2\cdots n!)$ 中, 我们总可以认清那个是 1 号态, 那个是 2 号态, 因此一切有关态置换运算可以毫不含糊地进行到底. 但一到态指标有重复时, 问题就出来了. 例如对于前述组态, 我们有 n_1 个 m_1 态, n_2 个 m_2 态……. 固然我们一开始可以勉强规定正序态 $|\omega\rangle$ 中的单粒子态的编码为

1) 如果采用 Jahn 的位相, 则有 $D^{(\widetilde{\nu})}_{\widetilde{m}\widetilde{k}}(R_a)=\delta_a D^{(\nu)}_{mk}(R_a)$.

$$|m_1\cdots m_1,\ m_2\cdots m_2,\ \cdots,\ m_l\cdots m_l\rangle\equiv|\omega\rangle=|i_1\cdots i_{n_1},\ i_{n_1+1}\cdots i_{n_1+n_2},\ \cdots i_{n-n_l+1},\ \cdots i_n\rangle. \tag{4-70a}$$

即按每个态在正序态中所处的位置编码. 这样也就确定了$\mathscr{S}_n$群$n!$个置换算符$\mathscr{P}_a$对正序态的作用. 不难看出, 在$n!$个态$\{\mathscr{P}_a|\omega\rangle\}$中只有$n$个是独立的

$$n=n!/(n_1!n_2!\cdots n_l!). \tag{4-70b}$$

其中一个就是正序态(4-70a)式, 其余$n-1$个都是非正序态. 对于这些非正序态, 我们就再也无法辨认那个m_1是1号态, 那个m_1是2号态, ……, 那个m_2是n_1+n_2号态了, ……, 因此也就无法确定态置换算符对任一个态$(\mathscr{P}_a|i_1i_2\cdots i_n\rangle)$的作用了. 这里出现了和量子力学中处理全同粒子相类似的问题. 在置换运算过程中, 我们无法始终认清态的编码, 只能知道m_1属于1, 2, $\cdots n_1$号态, m_2属于n_1+1, $\cdots n_1+n_2$号态, ……, 等等. 总之, 在态指标有重复时, 态置换群的单个群元一般没有确定作用.

记住态置换群是内禀置换群S_n的一种具体表现, 对于(4-70a)式这样的内禀态, 我们在§3.13中已经指出, 一般说单个内禀群元没有确定作用, 而只有内禀群$\bar{S}_n$及其某些特定的子群的类算符有确定作用, 并且给出了寻找这些具有确定作用的类算符的方法. 容易看出(4-70a)式在$S_{n_1}(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1)$, $S_{n_2}(n_1+1,\ \cdots,\ n_1+n_2)$, ……, $S_{n_l}(n-n_l+1,\cdots,n)$这些子群的作用下是不变的, 和这些子群的元素都对易的类算符有S_{n_1}, $S_{n_1+n_2}$, ……, S_{n-n_l}和S_n群的类算符$C(n_1)$, $C(n_1+n_2)$, ……, $C(n-n_l)$, $C(n)$, 于是由§3.13知道, 有确定作用的内禀类算符为$\bar{C}(n_1)$, $\bar{C}(n_1+n_2)$, ……, $\bar{C}(n-n_l)$, $\bar{C}(n)$. 因此态置换群链$\mathscr{S}_n\supset\mathscr{S}_{n-n_l}\supset\cdots\supset\mathscr{S}_{n_1+n_2}\supset\mathscr{S}_{n_1}$中各子群的CSCO-I

$$(\mathscr{C};\ \mathscr{C}(s))=(\mathscr{C}(n);\ \mathscr{C}(n-n_l),\ \cdots,\ \mathscr{C}(n_1+n_2),\ \mathscr{C}(n_1)) \tag{4-71}$$

有确定作用, 也就是说, $\mathscr{C}(n_1)$的作用结果和我们把那个m_1当作1, 那个m_1当作2, ……, 那个m_1当作n_1是无关的; $\mathscr{C}(n_1+n_2)$的作用结果和我们把那个m_2当作n_1+1, $\cdots$, 那个m_2当作n_1+n_2无关, …….

例 设有$(\alpha)(\beta)^2(\gamma)$组态. 态的编号取$i_1=\alpha$, $i_2=i_3=\beta$, $i_4=\gamma$. 正序态$|\alpha\beta\beta\gamma\rangle$在$S_4$群作用下可得到12个线性独立态. 对这12个态只有$\mathscr{C}(4)=C(4)$, $\mathscr{C}(3)$有确定作用, $\mathscr{C}(2)$没有确定作用. 例如

$$\mathscr{C}(3)|\beta\alpha\beta\gamma\rangle=\mathscr{C}(3)|i_2i_1i_3i_4\rangle=\mathscr{C}(3)|i_3i_1i_2i_4\rangle=|\beta\beta\alpha\gamma\rangle+|\beta\alpha\beta\gamma\rangle+|\alpha\beta\beta\gamma\rangle. \tag{4-72}$$

这里有两个β态. 可任取一个作为i_2, 另一个作为i_3, 结果都一样.

2. 置换群亚标准基

为了区别正则和非正则情形下的两种态置换群链, 和原来称$\mathscr{S}_n\supset\mathscr{S}_{n-1}\supset\cdots\supset\mathscr{S}_2\supset\mathscr{S}_1$为整链相对应, 称$\mathscr{S}_n\supset\mathscr{S}_{n-n_l}\supset\cdots\supset\mathscr{S}_{n_1+n_2}\supset\mathscr{S}_{n_1}$这种有跳断的群链为断链. 断链是一种非正则子群链$G\supset G(s')$, 在$(\nu)$不可约空间内, 它所对应的算符$(\mathscr{C},\ \mathscr{C}(s'))$只有$\tau_\nu<h_\nu$个不同的本征值. 根据(3-260)式, 一个自然的推广是把非正则链情形下的$G\supset G(s')$分类基就定义为下列本征方程的解

$$\begin{pmatrix}\mathscr{C}\\ \mathscr{C}(s')\end{pmatrix}\psi^{(\nu)\varkappa}=\begin{pmatrix}\nu\\ \varkappa\end{pmatrix}\psi^{(\nu)\varkappa},\quad \varkappa=\varkappa_1,\ \cdots,\ \varkappa_{\tau_\nu}, \tag{4-73a}$$

$$\mathscr{C}(s')=(\mathscr{C}(n-n_l),\ \cdots,\ \mathscr{C}(n_1+n_2),\ \mathscr{C}(n_1)), \tag{4-73b}$$

$$\varkappa=(\bar{\lambda}(n-n_l),\ \cdots,\ \bar{\lambda}(n_1+n_2),\ \bar{\lambda}(n_1)). \tag{4-73c}$$

注意,(这里$\mathscr{C}(j)\ (j=n,\ n-n_l,\ \cdots)$为$\mathscr{S}_j$群的CSCO-I,而不是仅仅代表$\mathscr{S}_j$的一个二循环类算符$\mathscr{C}_{(2)}(j)$. 进一步的说明见第4小节). 由于$n_1$个$m_1$态必属于态置换群$\mathscr{S}_{n_1}$的全对称表示,可以取$\mathscr{S}_{n_1}$的二循环类算符作为$\mathscr{C}(n_1)$,于是$\mathscr{C}(n_1)$的本征值就是$n_1$个数中任取两个的组合数

$$\bar{\lambda}(n_1)=\frac{n_1(n_1-1)}{2}.$$

我们称(4-73)的解$\psi^{(\nu)\varkappa}$为态置换群$\mathscr{S}_n$的亚标准基,它是按断链$\mathscr{S}_n\supset\mathscr{S}(n-n_l)\supset\cdots\supset\mathscr{S}(n_1+n_2)\supset\mathscr{S}(n_1)$的不可约表示进行分类的基,它分别属于$\mathscr{S}_n$, $\mathscr{S}(n-n_l)$, $\cdots$, $\mathscr{S}(n_1+n_2)$和$\mathscr{S}(n_1)$群的不可约表示(ν), $\bar{\lambda}(n-n_l)$, $\cdots$, $\bar{\lambda}(n_1+n_2)$和$\bar{\lambda}(n_1)$. $\mathscr{S}_n$群亚标准基$\psi^{(\nu)\varkappa}$对量子数ν, $\varkappa$保持正交. 但它在$\mathscr{S}_n$群置换算符下的变换性质不再成立,

$$\mathscr{P}\psi^{(\nu)\varkappa}\neq\sum_{\varkappa'}D^{(\nu)}_{\varkappa'\varkappa}(p)\psi^{(\nu)\varkappa'}. \tag{4-74}$$

因为$\mathscr{S}_n$群的单个群元$\mathscr{P}$对$\psi^{(\nu)\varkappa}$没有确定作用.

根据以上讨论,我们立即得到将S_n群的非正则表示完全分解的方法:

将S_n群的标准基(νm)和$\mathscr{S}_n$群的亚标准基$(\nu\varkappa)$, $\psi^{(\nu)\varkappa}_m$,用(4-70)式产生的N个线性独立的可约基φ_a展开

$$\psi^{(\nu)\varkappa}_m=\sum_{a=1}^{N}u_{\nu m\varkappa,a}\varphi_a, \tag{4-75a}$$

$$\varphi_a=p_a|\underbrace{m_1\cdots m_1}_{n_1},\ \cdots,\ \underbrace{m_l\cdots m_l}_{n_l}\rangle=p_a|\omega\rangle. \tag{4-75b}$$

$\psi^{(\nu)\varkappa}_m$满足本征方程

$$\begin{pmatrix}C_{(2)}(n)\\ C(s)\\ \mathscr{C}(s')\end{pmatrix}\psi^{(\nu)\varkappa}_m=\begin{pmatrix}\nu\\ m\\ \varkappa\end{pmatrix}\psi^{(\nu)\varkappa}_m, \tag{4-76}$$

$$m=m_1,\ m_2,\ \cdots m_{h_\nu},$$

$$\varkappa=\varkappa_1,\ \varkappa_2,\ \cdots\varkappa_{\tau_\nu},\qquad N=\sum_\nu\tau_\nu h_\nu.$$

式中$C(s)$仍为$n-2$个二循环类算符的集合

$$C(s)=(C_{(2)}(n-1),\ C_{(2)}(n-2),\ \cdots,\ C_{(2)}(2)).$$

由(4-75)式和(4-76)式得到$u_{\nu m\varkappa,a}$满足的本征方程

$$\sum_{b=1}^{N}\left[\left\langle\varphi_a\left|\begin{matrix}C_{(2)}(n)\\ C(s)\\ \mathscr{C}(s')\end{matrix}\right|\varphi_b\right\rangle-\begin{pmatrix}\nu\\ m\\ \varkappa\end{pmatrix}\delta_{ab}\right]u_{\nu m\varkappa,b}=0. \tag{4-77}$$

$\psi^{(\nu)\varkappa}_m$满足正交归一完备性(在该非正则表示空间内完备).

$$\begin{gathered}\langle\psi^{(\nu)\varkappa}_m|\psi^{(\nu')\varkappa'}_{m'}\rangle=\delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{\varkappa\varkappa'}\\ \sum_{\nu m\varkappa}|\psi^{(\nu)\varkappa}_m\rangle\langle\psi^{(\nu)\varkappa}_m|=1\\ \sum_{a=1}^{N}u^*_{\nu m\varkappa,a}u_{\nu'm'\varkappa',a}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{\varkappa\varkappa'}\\ \sum_\nu\sum_{m=1}^{h_\nu}\sum_{\varkappa=1}^{\tau_\nu}u^*_{\nu m\varkappa,a}u_{\nu m\varkappa,a'}=\delta_{aa'}\end{gathered} \tag{4-78}$$

注意,虽然形式上(4-78)式和(3-217)式及(3-180)式很相象,但现在的$u_{\nu m\varkappa,a}$不再和不可约矩阵元$D^{(\nu)}_{mk}(a)$有直接联系.

$u_{\nu m\varkappa,a}$ 的具体求法见§ 4.9.

3．投影算符和亚标准基

一般文献上(Bohr I 附录 IC, Patterson)常认为对非正则表示情形，仍可用投影算符 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 从正序态(4-70a)式中投影出态置换群 $\mathscr{S}_n$ 的标准基 $\psi^{(\nu)k}$

$$\psi_m^{(\nu)k}(\omega)=\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\omega\rangle,\quad \mathring{P}_m^{(\nu)k}=\sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\sum_{a=1}^{n!}D_{mk}^{(\nu)}(p_a)p_a. \tag{4-79}$$

初看上去，这似乎是毋庸置疑，因为不管正序态 $|\omega\rangle$ 中态指标有无重复，似乎只要利用投影算符的性质(3-169)式以及 $\mathscr{P}$ 和 $\bar{p}$ 的关系 $\bar{p}=\mathscr{P}^{-1}$，就能"证明"投影基(4-79)式满足

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \mathscr{C}(s)\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)k}(\omega)=\begin{pmatrix}\nu\\ m\\ k\end{pmatrix}\psi_m^{(\nu)k}(\omega), \tag{4-80a}$$

$$\mathscr{P}\psi_m^{(\nu)k}(\omega)=\sum_{k'}D_{k'k}^{(\nu)}(p)\psi^{(\nu)k'}(\omega). \tag{4-80b}$$

根据前面讨论知道，(4-80a)式关于 $\mathscr{C}(s)$ 的本征方程中，其实只有 $\mathscr{C}(s')$ [(4-73)式]的方程才是有意义的，其余的本征方程没有意义．因此量子数集 $k=(\bar{\lambda}(n-1),\bar{\lambda}(n-2),\cdots,\lambda(2))$ 中，只有 $\mathscr{C}(s')$ 的量子数 $\varkappa=(\bar{\lambda}(n-n_l),\cdots,\bar{\lambda}(n_1+n_2),\bar{\lambda}(n_1))$ 是真实的，其余都是虚假的，应予以剔除．此外(4-80b)式实质上也不成立．那么前面关于(4-80)式成立的'证明'又是怎么回事呢？(4-80)式在什么意义下成立呢？我们说(4-80)式只在'形式上'成立，即如果我们不管 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\omega\rangle$ 是否等于零，也不管 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\omega\rangle$ 和 $\mathring{P}_m^{(\nu)k'}|\omega\rangle$ 是否线性相关，同时也不管它们是不归一化的，形式上把每一个 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\omega\rangle$ 都当作一个不可约基，则(4-80)式成立．由此看到，这仅仅说明投影算符 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}$ 为内禀群 $\bar{S}_n$ 的标准基，并不说明 $\mathring{P}_m^{(\nu)k}|\omega\rangle$ 是态置换群 $\mathscr{S}_n$ 的标准基.

现在说明一下，在态指标有重复时如何正确理解和使用投影算符．这时投影态 $\psi_m^{(\nu)k}(\omega)$ [(4-79)式]是不归一的 S_n 的标准基(νm)分量和 $\mathscr{S}_n$ 的亚标准基($\nu\varkappa$)分量，略去下标 m 可写为

$$\psi^{(\nu)k}(\omega)=\mathring{P}^{(\nu)k}|\omega\rangle=R^{(\nu)k}(\omega)\psi^{(\nu)\varkappa}(\omega)^{1)}, \tag{4-81a}$$

$$R^{(\nu)k}(\omega)=\left(\sqrt{\frac{n!}{h_\nu}}\langle\omega|\mathring{P}_k^{(\nu)k}|\omega\rangle\right)^{1/2}=[\langle\omega|\sum_p D_{kk}^{(\nu)}(p)p|\omega\rangle]^{1/2}=[\sum_p{}' D_{kk}^{(\nu)}(p)]^{1/2}. \tag{4-81b}$$

这里 $\psi^{(\nu)\varkappa}(\omega)$ 为正交归一的亚标准基，$R^{(\nu)k}(\omega)$ 为归一系数．推导时利用了(3-224)和(3-182)式．(4-81b)中带撇的和号表示只对满足 $p|\omega\rangle=|\omega\rangle$ 的置换 p 求和．例如

$$R^{[\nu]k}(\alpha\alpha\beta\gamma\gamma)=D_{kk}^{[\nu]}(12)+D_{kk}^{[\nu]}(45)+D_{kk}^{[\nu]}((12)(45)). \tag{4-81c}$$

当 $|\omega\rangle$ 中所有单粒子态全不相同时，归一系数 $R^{[\nu]k}(\omega)=1$，亚标准基和标准基重合.

由(4-81b)看到，$R^{[\nu]k}(\omega)$ 具有以下性质

$$R^{[\nu]k}(i_1i_2\cdots i_ni_{n+1}\cdots i_p)=R^{[\nu']k'}(i_1i_2\cdots i_n), \tag{4-81d}$$

当

$$i_n\neq i_{n+1}\neq i_{n+2}\neq\cdots\neq i_p$$

这里 $[\nu']k'$ 可这样得出，把 $R^{[\nu]k}(\omega)$ 看作为杨盘 $Y_k^{[\nu]}$ 和 Weyl 盘的函数，$R^{[\nu]k}(\omega)=R(Y_k^{[\nu]},W)$．把 W 盘中标以态指标 i_{n+1}, i_{n+2}, $\cdots i_p$ 的方块去掉，剩下的 W' 盘决定了 $[\nu']$，然后在杨盘 $Y_k^{[\nu]}$ 中去掉相应的方块，剩下的就是 $Y_{k'}^{[\nu']}$．例如

1) 我们用 $\psi^{(\nu)k}(\omega)$ (k 中包含虚假量子数)代表非归一基，用 $\psi^{(\nu)\varkappa}(\omega)$ ($\varkappa$ 为真实量子数)代表归一基.

表 4.8 归一系数 $R^{[\nu]m}(\omega)=\left(\omega\left|\sum D^{\nu}_{mm}(p)p\right|\omega\right)^{\frac{1}{2}}$

(ω) ＼ $[\nu]$ / m	[3]	[21]	
	1	1	2
$(\alpha\beta\beta)$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$

(ω) ＼ $[\nu]$ / m	[4]	[31]			[22]		[211]		
	1	1	2	3	1	2	1	2	3
$(\alpha\beta\gamma\gamma)$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{4}{3}}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$			$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{4}{3}}$
$(\alpha\alpha\beta\beta)$	2	$\sqrt{\frac{4}{3}}$	$\sqrt{\frac{8}{3}}$		2				
$(\alpha\beta\beta\beta)$	$\sqrt{6}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{4}{3}}$	2					

(ω) ＼ $[\nu]$ / m	[5]	[41]				[32]				
	1	1	2	3	4	1	2	3	4	5
$(\alpha\beta\gamma\gamma\delta)$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{5}{4}}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$
$(\alpha\alpha\beta\gamma\gamma)$	2	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{\frac{5}{2}}$	2		2	1		$\sqrt{3}$	
$(\alpha\beta\beta\gamma\gamma)$	2	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{\frac{5}{2}}$	1	$\sqrt{3}$	2	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\frac{3}{2}$
$(\alpha\beta\gamma\gamma\gamma)$	$\sqrt{6}$	1	$\sqrt{\frac{5}{3}}$	$\sqrt{\frac{10}{3}}$	$\sqrt{6}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$		2	
$(\alpha\alpha\beta\beta\beta)$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{10}{3}}$	$\sqrt{\frac{20}{3}}$		$\sqrt{\frac{4}{3}}$	$\sqrt{\frac{8}{3}}$		$\sqrt{8}$	
$(\alpha\alpha\alpha\beta\beta)$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{\frac{9}{2}}$	$\sqrt{\frac{15}{2}}$			$\sqrt{12}$				
$(\alpha\beta\beta\beta\beta)$	$\sqrt{24}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{\frac{5}{2}}$	$\sqrt{5}$	$\sqrt{15}$					

(ω) ＼ $[\nu]$ / m	[311]						[221]					[21³]			
	1	2	3	4	5	6	1	2	3	4	5	1	2	3	4
$(\alpha\beta\gamma\gamma\delta)$		$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{5}{4}}$	$\sqrt{\frac{5}{4}}$	$\sqrt{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}$				$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{5}{4}}$
$(\alpha\alpha\beta\gamma\gamma)$		$\sqrt{\frac{3}{2}}$		$\sqrt{\frac{5}{2}}$			1		$\sqrt{3}$						
$(\alpha\beta\beta\gamma\gamma)$		$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{9}{8}}$	$\sqrt{\frac{5}{8}}$	$\sqrt{\frac{15}{8}}$		$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\sqrt{\frac{3}{4}}$	$\frac{3}{2}$					
$(\alpha\beta\gamma\gamma\gamma)$			1		$\sqrt{\frac{5}{3}}$	$\sqrt{\frac{10}{3}}$									
$(\alpha\alpha\beta\beta\beta)$															
$(\alpha\alpha\alpha\beta\beta)$															
$(\alpha\beta\beta\beta\beta)$															

1. 空白处代表该值为零.

2. 若正序态(ω)中所有单粒子态全相同，而$[\nu]$为全对称表示，则 $R^{[\nu]}(\omega)=\sqrt{\frac{1}{n!}}$.

3. 利用(4-81d)式可得到没有列入表内的一些系数值。

$$R^{[51]4}(\alpha\beta\beta\gamma\delta\varepsilon)=R\begin{pmatrix}12456, & i_1i_2i_4i_5i_6\\ 3 & i_3\end{pmatrix}=R\left(\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline 1&2&4&5&6\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma&\delta&\varepsilon\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)$$

$$=R\left(\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)=R^{[21]1}(\alpha\beta\beta). \qquad (4\text{-}81e)$$

表 4.8 给出了 S_2-S_5 群的归一系数.

注意 可能有几个不同 k 的投影算符 $\mathring{P}^{(\nu)k}$ 投影出同一个亚标准基 $\psi^{(\nu)\varkappa}$，这是因为从不同的量子数集 k 中剔除虚假量子数后可能给出同一个真实量子数 $\varkappa$. 例如对 $(\alpha)(\beta)^2(\delta)$ 组态，只有 $\mathscr{C}(4)$，$\mathscr{C}(3)$ 有确定作用，而 $\mathscr{C}(2)$ 没有确定作用，它的本征值 $\bar{\lambda}_2$ 应从 k 中剔除. 例如从两组 $k=(\bar{\lambda}_3,\ \bar{\lambda}_2)$ 值，即 $k=(0,\ 1)$，和 $k'=(0,\ -1)$ 中剔除虚假量子数 $\bar{\lambda}_2$ 后，它们给出同一真实量子数 $\varkappa=\bar{\lambda}_3=0$. 由 (4-81) 式和表 4.8 可得

$$\psi^{(2),0,*}(\alpha\beta\beta\delta)=\sqrt{2}\ \psi^{(2),0,1}(\alpha\beta\beta\delta)-\sqrt{\frac{2}{3}}\,\psi^{(2),0,-1}(\alpha\beta\beta\delta), \qquad (4\text{-}82)$$

式中 $\psi^{(2),0,*}$ 为 $\mathscr{S}_4$ 群亚标准基. 在 $\bar{\lambda}_2$ 的位置上打"*"表示它不是 $\mathscr{S}_2$ 群的不可约基，即 $\mathscr{S}_2$ 群的类算符 $\mathscr{C}(2)=\mathscr{P}_{12}$ 对它没有确定作用.

4. 亚标准基的标志，Weyl 盘和 Gelfand 记号

我们在 § 4.7 讨论了正序态 $|\omega_0\rangle$ 中态指标全不相同的不可约基 $\psi_m^{(\nu)k}(\omega_0)$，并改用 Weyl 盘来代替量子数 k，即用 $\psi_m^{(\nu)}(W_k)$ 来标志一个不可约基. 态指标没有重复时的 $\psi_m^{(\nu)k}(\omega_0)$ 或 $\psi_m^{(\nu)}(W_k)$ 和态指标有重复时的投影态 $\psi_m^{(\nu)k}(\omega)$ 的关系非常简单，只需在 $\psi_m^{(\nu)k}(\omega_0)$ 中，令 $\omega_0\to\omega$ 就行，例如

$$\psi_m^{(\nu)k}(\alpha\beta\beta\delta)=\psi_m^{(\nu)k}(\alpha\beta\gamma\delta)\big|_{\gamma=\beta}. \qquad (4\text{-}83a)$$

这一手续可称为同化手续. 如果用 Weyl 盘标志，并取 $(\nu)k=(2),\ 0,\ 1$ 和 $(2),\ 0,\ -1$ 为例

$$\psi_m^{(2),0,1}(\alpha\beta\beta\delta)=\psi_m^{(31)}\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\delta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right)\Bigg|_{\gamma=\beta},$$

$$\psi_m^{(2),0,-1}(\alpha\beta\beta\delta)=\psi_m^{(21)}\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)\Bigg|_{\gamma=\beta}. \qquad (4\text{-}83b)$$

由此看到，我们可用态指标有重复的 Weyl 盘来标志置换群亚标准基，这样 (4-82) 式可写成

$$\psi^{(2),0,*}(\alpha\beta\beta\delta)=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\delta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\sqrt{2}\,\psi\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\delta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right)\Bigg|_{\gamma=\beta}-\sqrt{\frac{2}{3}}\,\psi\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)\Bigg|_{\gamma=\beta}.$$

下面证明，若一个 Weyl 盘中有两个相同的态指标出现在同一列，则它所对应的亚标准基必为零，例如

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\\hline \alpha\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle\propto\psi\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)\Bigg|_{\beta=\alpha}=0.$$

因为 § 4.7 已经讲过，$\psi\left(\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right)$ 对交换 α，β 为反对称，故当 $\beta=\alpha$ 时必为零. 以上证明容易推广到一般情形.

现在我们可给 Weyl 盘下一个普遍的定义：在 S_n 群的杨图 $[\nu]$ 中按下列规则填入被占据的单粒子态 $m_1,\ \cdots,\ m_l$ 所得到的一个盘称为 Weyl 盘：

(a) 不允许有相同的 m 出现在同一列中.

(b) 当我们在任一行中从左向右读，以及在任一列中从上往下读时，m 的编码必须是不减少的（首先是所有的 m_1，其次是所有 m_2，……）。

在§4.3中我们说明了一个杨盘如何规定了 S_n 群的一个标准基．现在来说明一个 Weyl 盘是如何规定 $\mathscr{S}_n$ 群的一个亚标准基的。

$\mathscr{S}_n$ 群亚标准基 $|W_x^{[\nu]}\rangle$ 分别属于 $\mathscr{S}_n$，$\mathscr{S}_{n-n_l}$，$\cdots\mathscr{S}_{n_1+n_2+\cdots+n_i}\cdots$，$\mathscr{S}_{n_1+n_2}$ 和 $\mathscr{S}_{n_1}$ 群的 $IR[\nu]$，$[\nu^{l-1}]$，…，$[\nu^i]$，…，$[\nu^2]$，$[\nu^1]$，把 Weyl 盘 $W_x^{[\nu]}$ 中填以 m_l 的 n_l 个方块去掉，剩下的杨图给出 $\mathscr{S}_{n-n_l}$ 群 $IR[\nu^{l-1}]$，…，把 $W_x^{[\nu]}$ 中填以 m_l，m_{l-1}，$\cdots m_{i+1}$ 的方块全去掉，剩下的杨图给出 $\mathscr{S}_{n_1+n_2+\cdots+n_i}$ 群的 $IR[\nu^i]$，…．例如

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline \beta&\beta&\delta\\\cline{1-3} \gamma&\delta\\\cline{1-2}\end{array}\longrightarrow\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline \beta&\beta\\\cline{1-2} \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\longrightarrow\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \beta&\beta\\\cline{1-2}\end{array}\longrightarrow\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline\end{array}\tag{4-84}$$

$\mathscr{S}_9[432]$　　$\mathscr{S}_7[421]$　　$\mathscr{S}_5[32]$　　$\mathscr{S}_2[2]$

最后讨论 $\mathscr{S}_n$ 群亚标准基的几种标志方法

(1) $\psi^{(\nu)x}(\omega)$。

$|\omega\rangle$ 为正序态，$(\nu, x)=(\bar{\lambda}(n), \bar{\lambda}(n-n_l), \cdots, \bar{\lambda}(n_1))$ 代表 l 个本征值．利用表 3.2-1，又可将后者换成 l 个配分，$[\nu]=[m_{1l}, m_{2l}, \cdots, m_{ll}]$，$[\nu^{l-1}]=[m_{1l-1}, \cdots m_{l-1\ l-1}]$，…，$[\nu^2]=[m_{12}, m_{22}]$，$[\nu^1]=[m_{11}]$，这样 $\psi^{(\nu)x}(\omega)$ 就等价于以下 Gelfand 标志方法

(2) 用 Gelfand 记号标志

$$\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m)\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix}m_{1l}\quad m_{2l}\cdots m_{ll}\\ m_{1l-1}\cdots m_{l-1\,l-1}\\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\ m_{12}m_{22}\\ m_{11}\end{pmatrix}\right\rangle,\quad [\nu]=[m_{1l}\cdots m_{ll}],\tag{4-85}$$

它表示该亚标准基分别属于 $\mathscr{S}_n, \mathscr{S}_{n-n_l}, \cdots, \mathscr{S}_{n_1+n_2}$ 和 $\mathscr{S}_{n_1}$ 群的 $IR[m_{1l}\cdots m_{ll}]$，$[m_{1l-1}\cdots m_{l-1\,l-1}]$ $\cdots[m_{12}m_{22}]$ 和 $[m_{11}]$。

(3) 用一个 Weyl 盘标志。

(4) 用态空间 Yamanouchi 数 r_m 及正序态 $|\omega\rangle$，即 $\psi^{[\nu]r_m}(\omega)$。

现举例说明如下：（单粒子顺序数 $\alpha=m_1$，$\beta=m_2$，$\gamma=m_3$）。

(i) $|\omega\rangle=|\alpha\alpha\beta\gamma\gamma\rangle$，

$$\psi^{(5),*,3,1}(\omega)=\left|\begin{pmatrix}4\ 1\ 0\\ 3\ 0\\ 2\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\ \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\ \right\rangle\propto\psi^{[41]21111}(\omega)\propto\psi^{[41]12111}(\omega)$$

分别属于 $\mathscr{S}_5$，$\mathscr{S}_3$ 和 $\mathscr{S}_2$ 群的 $IR[41]$，$[3]$ 和 $[2]$．它不是 $\mathscr{S}_4$ 群的 IR 基。

(ii) $|\omega\rangle=|\alpha\alpha\beta\beta\beta\rangle$

$$\psi^{(2),*,*,1}(\omega)=\left|\begin{pmatrix}3\ 2\\ 2\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \beta&\beta\\\cline{1-2}\end{array}\ \right\rangle\propto\psi^{[32]22111}(\omega)\propto\psi^{[32]21211}(\omega)\propto\psi^{[32]12211}(\omega)$$

分别属于 $\mathscr{S}_5$ 和 $\mathscr{S}_2$ 群的 $IR[32]$ 和 $[2]$，但不是 $\mathscr{S}_3$ 和 $\mathscr{S}_4$ 群的 IR 基。

(iii) $|\omega\rangle=|\alpha\beta\beta\beta\gamma\gamma\rangle$

$$\psi^{(3,4),*,2,*,*}(\omega)=\left|\begin{pmatrix}4&1&1\\&3&1\\&&1\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\beta&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle,$$

$$\psi^{(3,-8),*,3,*,*}(\omega)=\left|\begin{pmatrix}3&3&0\\&3&1\\&&1\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\beta\\\hline \beta&\gamma&\gamma\\\hline\end{array}\right\rangle.$$

这里(3, 4)和(3, −8)为 S_6 群 CSCO-I($C_{(2)}(6)$, $C_{(3)}(6)$)的本征值. 由此看到, 对断链情形, 仅用 $\mathscr{S}_n$, $\mathscr{S}_{n-n_i}$, … 群的 2-循环类算符的本征值不足以唯一标志一个亚标准基, 所以(4-73b)式中的 $\mathscr{C}(j)$ 应取为 $\mathscr{S}_j$ 群的 CSCO-I.

从以上例子看到, (1), (2), (3) 种标志方法是一、一对应的

$$\psi^{(\nu)\kappa}(\omega)=\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\m\end{pmatrix}\right\rangle=|W^{[\nu]}_{\kappa}\rangle, \tag{4-86}$$

根据需要可采用任一种标志. 但用 Yamanouchi 数 r_m 标志则不唯一, 可以有几个 r_m 对应于同一个态. 对态指标没有重复的情形, 即对 $\mathscr{S}_j$ 群的标准基, 则以上四种标志方法都是一一对应的.

$\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon$ 组态

$IR(5)$ 有 $h_\nu=4$ 个标准基

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma&\delta\\\hline \varepsilon\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),6,3,1}(\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma&\varepsilon\\\hline \delta\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),2,3,1}(\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\delta&\varepsilon\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),2,0,1}(\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta&\varepsilon\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),2,0,-1}(\alpha\beta\gamma\delta\varepsilon)$$

从机场(5)出发共有 $h_\nu=4$ 条航线(5, 6, 3, 1)(5, 2, 3, 1)(5, 2, 0, 1) 和 (5, 2, 0, −1).

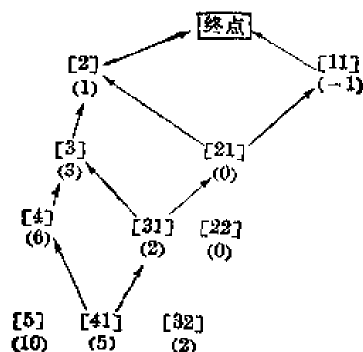


图 4.8-1a 置换群 S_5 的标准基

$(\alpha)^2\beta(\gamma)^2$ 组态

$IR(5)$ 有 $\tau_\nu=2$ 个亚标准基

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),*,3,1}(\alpha\alpha\beta\gamma\gamma)$$

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\gamma&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}=\psi^{(5),*,0,1}(\alpha\alpha\beta\gamma\gamma)$$

从机场 (5) 出发只有 $\tau_\nu=2$ 条直达航线(5, *, 3, 1)(5, *, 0, 1). 这里在 λ(4) 的位置上打一"*"表示它不是 $\mathscr{S}_4$ 的 IR 基.

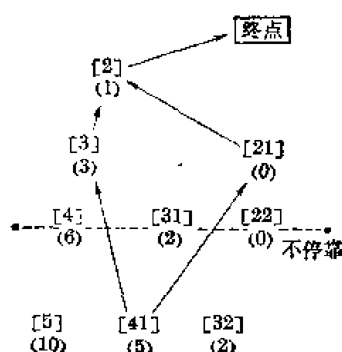


图 4.8-1b 置换群 S_5 的亚标准基

我们在§4.5中曾说明过图4.5-3上的一条“航线”代表S_n(或$\mathscr{S}_n$)群的一个标准基，它是以沿途停靠的$n-1$个“机场”的“名称”$\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2$标志的．对于$\mathscr{S}_n$群的亚标准基，我们仍可用一条航线来代表，只不过现在的航线不是每一级机场都停靠，而是某些机场间的直通航线．它仍可用沿途停靠的l个机场的名称$\bar{\lambda}(n)$，$\bar{\lambda}(n-n_l)$，…，$\bar{\lambda}(n_1)$来标志．这样从n级机场$\lambda(n)$出发到达终点的所有可能的航线数目少了，因此$\tau_\nu<h_\nu$．图4.8-1就以$\mathscr{S}_5$群$IR(5)$(即[41]表示)的标准基和亚标准基为例作一比较．

§4.9　求置换群标准基的本征函数法(II)

本节介绍利用Weyl盘和内禀量子数来进一步简化S_n群不可约基的计算，这样求出的不可约基同时也是态置换群$\mathscr{S}_n$的亚标准基．§4.6的步骤(1)，(2)，(3)，(5)现在仍适用，只需将第4个步骤改为

(4a) 根据n个粒子所处的组态$(\alpha)^{n_1}(\beta)^{n_2}\cdots$及填写Weyl盘规则，写出所有可能的Weyl盘．由此就可确定该组态内可能出现的$IR[\nu]$及其多重性τ_ν．利用杨图$[\nu]$和本征值λ_n的对应关系(4-3a)式或图4.5-3就可知道本征值λ_n及其多重性τ_ν，从而避免了求解久期方程的根的问题．

例　$(\alpha)^2(\beta)(\gamma)$组态有以下可能的Weyl盘

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta&\gamma\\\hline\end{array}\qquad \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}\qquad \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\gamma\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\qquad \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta&\gamma\\\hline\end{array}\qquad \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\alpha\\\hline \beta\\\cline{1-1} \gamma\\\cline{1-1}\end{array} \tag{4-87a}$$

因此$\tau_{[4]}=\tau_{[22]}=\tau_{[211]}=1$，$\tau_{[31]}=2$．利用图4.5-3，知道这对应于单根$\lambda_4=6$，0，$-2$和二重根$\lambda_4=2$．由于全对称解$\lambda_4=6$中不可能包含$\lambda_2=-1$，所以立即可知(4-45)式的久期方程的根为单根$\lambda_4=0$，$-2$，和二重根，$\lambda_4=2$．

(4b) 若$\tau_\nu=1$，则从$(C, C(s))$的本征方程就能把解唯一定下来．若$\tau_\nu>1$，则需进一步解$\mathscr{C}(s')$的本征方程．由前面的Weyl盘可定出$\mathscr{C}(s')$的本征值$\varkappa$，而不必通过解久期方程来定本征值．将本征值代入(4-77)式就可解出$u_{\nu m_\varkappa,a}$．

作为上述方法应用的一个例子，让我们再看§4.6中$(\alpha)^2\beta\gamma$组态．对该组态，$\mathscr{S}_2$群的元素恒等于幺元素，$\mathscr{S}_3$群的CSCO有确定意义．对二重根$\lambda_4=2$在§4.6中解(4-48a)式时，因为少一个独立方程，我们随便取了两组互相正交的解．现在我们则可以利用$\mathscr{C}(s')=\mathscr{C}(3)$的本征方程将解完全定下来．(4-48a)式中只有两个变数是独立的，例如选为u_4，u_2．将$\mathscr{C}(3)$作用在$\varphi_4=|\gamma\alpha\beta\alpha\rangle$上得到

$$\begin{aligned}\mathscr{C}(3)\varphi_4=\mathscr{C}(3)\,|\gamma\alpha\beta\alpha\rangle&=(\mathscr{P}_{12}+\mathscr{P}_{23}+\mathscr{P}_{13})\,|i_4i_1i_3i_2\rangle\\&=|\gamma\alpha\beta\alpha\rangle+|\gamma\alpha\alpha\beta\rangle+|\gamma\beta\alpha\alpha\rangle=\varphi_4+\varphi_7+\varphi_{12}.\end{aligned}\tag{4-87b}$$

再利用(3-75b)就得到关于u_4的一个方程

$$u_4+u_7+u_{12}=\bar{\lambda}_3u_4.$$

由(4-43)式和(4-48a)式，上式变成

$$3u_4+u_{10}=\bar{\lambda}_3u_4.\tag{4-87c}$$

(4-87a)式中Weyl盘$\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline \gamma\\\cline{1-1}\end{array}$对应于$\lambda_3=3$，将此值代入(4-87c)式得到一组解：$u_{10}=0$，

表 4.9　$(\alpha)(\beta)(\gamma)^2$ 组态 S_4 群的标准基和 S_4 群的亚标准基[1)]

$\lambda_4\lambda_3\lambda_2$	$\bar{\lambda}_2$	杨　盘	W　盘	$\|\alpha\beta\gamma\gamma\rangle$	$\|\beta\alpha\gamma\gamma\rangle$	$\|\gamma\alpha\beta\gamma\rangle$	$\|\gamma\beta\alpha\gamma\rangle$	$\|\beta\gamma\alpha\gamma\rangle$	$\|\alpha\gamma\beta\gamma\rangle$	$\|\gamma\alpha\gamma\beta\rangle$	$\|\gamma\beta\gamma\alpha\rangle$	$\|\gamma\gamma\beta\alpha\rangle$	$\|\gamma\gamma\alpha\beta\rangle$	$\|\beta\gamma\gamma\alpha\rangle$	$\|\alpha\gamma\gamma\beta\rangle$
6, 3, 1	1	1234	$\alpha\beta\gamma\gamma$	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{12}}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$
2, 5, 1	1	123 4		$\boxed{\sqrt{\frac{1}{12}}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$
2, 0, 1	1	124 3	$\alpha\beta\gamma$ γ	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{6}}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$
2, 0, −1	1	134 2				$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{8}}}$	$-\boxed{\sqrt{\frac{1}{8}}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$			$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$
2, 3, 1	−1	123 4								$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$
2, 0, 1	−1	124 3	$\alpha\gamma\gamma$ β			$\sqrt{\frac{3}{16}}$	$-\sqrt{\frac{3}{16}}$	$-\sqrt{\frac{3}{16}}$	$\boxed{\sqrt{\frac{3}{16}}}$	$\sqrt{\frac{1}{48}}$	$-\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\sqrt{\frac{1}{48}}$
2, 0, −1	−1	134 2		$\boxed{\frac{1}{2}}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$			$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$
−2, 0, 1	−1	12 3 4				$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\boxed{\frac{1}{4}}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$
−2, 0, −1	−1	13 2 4	$\alpha\gamma$ β γ	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{12}}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\sqrt{\frac{1}{48}}$	$-\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\sqrt{\frac{3}{16}}$	$-\sqrt{\frac{3}{16}}$			$\sqrt{\frac{3}{16}}$	$-\sqrt{\frac{3}{16}}$
−2, −3, −1	−1	14 2 3		$\boxed{\sqrt{\frac{1}{6}}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$						
0, 0, 1	1	12 34	$\alpha\beta$ $\gamma\gamma$	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{6}}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$
0, 0, −1	1	13 24				$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\boxed{\sqrt{\frac{1}{8}}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$			$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$

1)　表中打方框者为主项系数，永为正值[见(4-60b)式]。

$u_4=1$(如果 u_4 也取为 0, 则为全零解, 没有意义). 这刚好就是 § 4.6 中对(4-48a)式取的头一组解. 另一个 Weyl 盘 $\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha & \alpha & \gamma \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}$ 对应于 $\bar{\lambda}_3=0$, 代入(4-87c)式, 得到一组解 $u_4=-1$, $u_{10}=3$. 这正好就给出解(4-49c). 当然 § 4.6 中任选的两组解和这里由 $\mathscr{C}(3)$方程定出的解相一致仅仅是一种偶然的巧合. § 4.6 中的第 3, 4 步骤也可改为以下步骤:

将每一允许的 Weyl 盘配上任一杨盘, $|Y_m^\nu, W_\varkappa^\nu\rangle$. 由杨盘、Weyl 盘和本征值的对应关系, 可知道它所对应的本征值$(\nu, m, \varkappa)$, 代入本征方程(4-76)式, 就可求出一个本征函数 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}=|Y_m^\nu, W_\varkappa^\nu\rangle$. 再利用(4-36)式求出其余的 $\psi_{m'}^{(\nu)\varkappa}$.

习　题

1. 求$(\alpha)(\beta)(\gamma)^2$组态 S_4 群的标准基和 $\mathscr{S}_4$ 群的亚标准基, 答案见表 4.9.

§ 4.10　置换群的内积和 CG 序列

一个微观粒子的状态可用一个波函数 $\psi(q)$ 来描写, q 代表粒子的全部坐标. 例如对于电子, q 代表空间坐标和自旋坐标; 对于核子, q 包括空间坐标、自旋坐标及同位旋坐标; 对于层子, q 包括空间坐标、自旋、味和色空间坐标. 讨论一个由 n 个粒子组成的系统的置换对称性时, 通常首先分别讨论各个自由度的置换对称性, 然后再讨论几个自由度合起来的置换对称性. 例如我们把粒子的坐标分成两部分, 即令

$$q=(x, \xi).$$

注意: 这儿既可以 x 代表空间坐标, ξ 代表自旋同位旋, 也可以 x 代表自旋, ξ 代表同位旋等等. 于是我们有三种置换群

置换群	置换算符	置换对象	IR 基
$S_n(x)$	${}^xp$	x	$\varphi_{m_1}^{(\nu_1)}(x)$
$S_n(\xi)$	${}^\xi p$	ξ	$\psi_{m_2}^{(\nu_2)}(\xi)$
$S_n(q)$	${}^qp\equiv p$	$q=(x, \xi)$	$\Psi_m^{(\nu)\tau}(q)$

根据定义显然有

$$[{}^xp, {}^\xi p]=0, \quad p={}^xp{}^\xi p.$$

置换群 $S_n(q)$ 称为 $S_n(x)$ 和 $S_n(\xi)$ 的内积. 如何将 $S_n(x)$ 的$[\nu_1]IR$ 基和 $S_n(\xi)$ 的$[\nu_2]IR$ 基的乘积 $\varphi_{m_1}^{(\nu_1)}(x)\psi_{m_2}^{(\nu_2)}(\xi)$ 线性组合成 $S_n(q)$ 的 IR 基 $\Psi_m^{(\nu)}(q)$, 就是置换群的内积约化问题. 显然这个问题就是我们刚刚提到的物理问题——如何把各个自由度已具有一定对称性的波函数组合成具有一定对称性的总波函数——的数学提法.

$S_n(x)$ 的 $IR[\nu_1]$ 和 $S_n(\xi)$ 的 $IR[\nu_2]$ 的乘积表示中包含 $S_n(q)$ 的那些 $IR[\nu]$, 这个问题通称为置换群的 CG 序列问题, 记为

$$[\nu_1]\times[\nu_2]=\sum_\nu(\nu_1\nu_2\nu)[\nu].$$

正整数$(\nu_1\nu_2\nu)$由(3-274)式决定. 由于现在特征标全为实数, (3-274)式变为

$$(\nu_1\nu_2\nu)=\frac{1}{g}\sum_i g_i\chi_i^{(\nu_1)}\chi_i^{(\nu_2)}\chi_i^{(\nu)}. \tag{4-88}$$

$(\nu_1\nu_2\nu)$满足对称性(3-276)式. 利用 $\chi_i^{(\tilde{\nu})}=\delta_i\chi_i^{(\nu)}$((4-5)式), 由上式又得

$$(\nu_1\nu_2\nu) = (\tilde{\nu}_1\tilde{\nu}_2\nu) = (\nu_1\tilde{\nu}_2\tilde{\nu}) = (\tilde{\nu}_1\nu_2\tilde{\nu}). \tag{4-89}$$

由 $\chi_i^{[n]}=1$, $\chi_i^{[1^n]}=\delta_i$, 显然可知

$$[\nu]\times[n]=[\nu], \quad [\nu]\times[1^n]=[\tilde{\nu}]. \tag{4-90}$$

由置换群特征标及(4–88)式，可算出置换群的 CG 序列. Itzykson 等人已用电子计算机计算了 $n\leqslant 8$ 的 $(\nu_1\nu_2\nu)$ 系数表. 表 4.10 表示 $n\leqslant 5$ 的 $(\nu_1\nu_2\nu)$ 系数表.

表 4.10 S_3–S_5 群的 CG 序列[1)]

(a) S_3 群

	[3]	[21]	[1³]
↑[21]×[21]	1	1	1

(b) S_4 群

	[4]	[31]	[22]	[211]	[1⁴]	
↑[31]×[31]	1	1	1	1		[31]×[211], [211]×[31]
[31]×[22]		1		1		[31]×[22], [211]×[22]
[22]×[22]	1		1		1	[22]×[22], [22]×[22]↓
	[1⁴]	[21²]	[2²]	[31]	[4]	

(c) S_5 群

	[5]	[41]	[32]	[311]	[2²1]	[21³]	[1⁵]	
↑[41]×[41]	1	1	1	1				[41]×[21³], [21³]×[41]
[41]×[32]		1	1	1	1			[41]×[2²1], [21³]×[32]
[41]×[311]		1	1	1	1	1		[41]×[311], [21³]×[311]
[32]×[32]	1	1	1	1	1	1		[32]×[2²1], [221]×[32]
[32]×[311]		1	1	2	1	1		[32]×[311], [221]×[311]
[311]×[311]	1	1	2	1	2	1	1	[311]×[311], [311]×[311]↓
	[1⁵]	[21³]	[2²1]	[311]	[32]	[41]	[5]	

1) 上表头和左表头相配合，下表头和右表头相配合.

§4.11 置换群 CG 系数的计算

我们用 $|m_1m_2\rangle$ (表 4.13 中则用 (m_1m_2)) 代表乘积基

$$|m_1m_2\rangle=\varphi_{m_1}^{[\nu_1]}(x)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\xi)=|Y_{m_1}^{[\nu_1]}Y_{m_2}^{[\nu_2]}\rangle. \tag{4-91}$$

如何把乘积基(4–91)式组合成 $S_n(q)$ 的 IR 基 $\Psi_m^{(\nu)}(q)$ 的问题就是置换群的 CG 系数问题，即

$$\Psi_m^{(\nu)\tau}(q)=\sum_{m_1m_2}C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{(\nu)\tau m}\varphi_{m_1}^{(\nu_1)}(x)\psi_{m_2}^{(\nu_2)}(\xi),\ \ \tau=1,\ 2,\ \cdots(\nu_1\nu_2\nu). \tag{4-92a}$$

$C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{(\nu)\tau m}$ 即 CG 系数，或称为置换群内积约化系数，τ 是一个附加指标，用来区分同一个 IR$[\nu]$ 在乘积表示中出现多次的情形.

由(4–91)(4–92a)式，可将置换群 CG 系数表成

$$C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}^{[\nu]\tau,m}=\langle Y_m^{[\nu]\tau}(q)\,|Y_{m_1}^{[\nu_1]}Y_{m_2}^{[\nu_2]}\rangle. \tag{4-92b}$$

虽然置换群 CG 系数十分重要(见 §7.9, §7.16 和文献 [12])，置换群的研究也已有长久的历史，但置换群 CG 系数问题却一直没有很好解决. Hamermesh(1962)用递推方法计算了[311]×[311]的 CG 系数. Vanagas(1972)给出了某些特殊情形下置换群 CG 系数的代数表达式. Schindler 和 Mirman(1977)用张量乘积分解方法计算了 S_6 群以内的 CG 系数. 不过因为他们计算的系数不是用根式，而是用 16 位小数表示出来的，所以没有公开发表.

用本征函数法计算置换群 CG 系数比较简单．且容易程序化，下面我们只介绍这一方法．

由(3-293)和(4-28c)得到置换群 CG 系数所满足的本征方程：

$$\sum_{m_1m_2}\left[\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle-\lambda_f\delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2}\right]C^{(\nu)\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=0,$$

$$f=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2,\quad \tau=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu_1\nu_2\nu),\tag{4-93}$$

$$(\nu,\ m)=(\lambda_n,\ \lambda_{n-1},\ \cdots,\ \lambda_2).$$

S_f 群二循环类算符的矩阵元可用以下递推公式计算

$$\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle=\sum_{i>j=1}^{f}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(ij)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(ij)$$

$$=\langle m_1'm_2'|C(f-1)|m_1m_2\rangle+\sum_{i=1}^{f-1}D^{(\nu_1)}_{m_1'm_1}(if)D^{(\nu_2)}_{m_2'm_2}(if).\tag{4-94}$$

用 h_1, h_2 表示 IR$[\nu_1]$和$[\nu_2]$的维数，令 $N=h_1h_2$，则

$$\boldsymbol{C}(f)=\|\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle\|_1^N\tag{4-95}$$

是 $N\times N$ 矩阵，它给出二循环类算符 $C(f)$ 在乘积表象（类似于角动量的非耦合表象）中的矩阵表示．将 $n-1$ 个矩阵 $\boldsymbol{C}(2)$, $\boldsymbol{C}(3)$, $\cdots$, $\boldsymbol{C}(n)$ 同时对角化的幺正变换就是置换群的 CG 系数（类似于角动量耦合系数）．

如果对应于本征值 $(\nu,\ m)=(\lambda_n,\ \lambda_{n-1},\ \cdots,\ \lambda_2)$ 方程(4-93)只有一个线性独立解，则表明 $(\nu_1\nu_2\nu)=1$，即 $IR[\nu]$ 只出现一次，这时附加指标 τ 可以省掉；如果对应于本征值 $(\nu,\ m)$，方程(4-93)有 l 组线性独立解，$(\nu_1\nu_2\nu)=l$，表明 $IR[\nu]$ 出现 l 次，则仅用量子数 $(\nu,\ m)$ 不能区分这 l 组线性独立解，须加上附加指标 $\tau=1,\ 2,\ \cdots l$．由于这些解的任意线性组合还是(4-93)式的解，所以我们总可选择适当的线性组合，使得 τ 不等的解互相正交，并且满足后面 § 4.12 给出的对称性．

容易证明类算符 $C(f)$ 的矩阵元有以下对称性：

(1) 由于置换群对换算符的 IR 矩阵都是实对称矩阵，所以 $\boldsymbol{C}(f)$ 也是实对称矩阵，即

$$\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle=\langle m_1m_2|C(f)|m_1'm_2'\rangle$$

$$=\langle m_1m_2'|C(f)|m_1'm_2\rangle=\langle m_1'm_2|C(f)|m_1m_2'\rangle.\tag{4-96}$$

(2) 由于共轭表示矩阵元满足(4-67)式，所以

$$\langle\widetilde{m}_1'\widetilde{m}_2'|C(f)|\widetilde{m}_1\widetilde{m}_2\rangle=\varLambda^{\nu_1}_{m_1'}\varLambda^{\nu_2}_{m_2'}\varLambda^{\nu_1}_{m_1}\varLambda^{\nu_2}_{m_2}\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle.\tag{4-97}$$

这儿 $\widetilde{m}_1$ 表示 m_1 的共轭基．利用这个对称性可以导出 CG 系数的一个重要对称性。为此先将 CG 系数的本征方程(4-93)式改写成

$$\sum_{\widetilde{m}_1\widetilde{m}_2}\langle\widetilde{m}_1'\widetilde{m}_2'|C(f)|\widetilde{m}_1\widetilde{m}_2\rangle C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2}=\lambda_fC^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1',\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2'}.\tag{4-98}$$

将(4-97)式代入(4-98)式得

$$\sum_{m_1m_2}\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle\varLambda^{\nu_1}_{m_1}\varLambda^{\nu_2}_{m_2}C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2}=\lambda_f\varLambda^{\nu_1}_{m_1'}\varLambda^{\nu_2}_{m_2'}C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1',\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2'}.\tag{4-99}$$

比较(4-93)式和(4-99)式可知

$$\varLambda^{\nu_1}_{m_1}\varLambda^{\nu_2}_{m_2}C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2}=\eta^{\nu\tau}_m\sum_{\tau'}a_{\tau\tau'}C^{\nu\tau'm}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}.\tag{4-100a}$$

由于 $\varLambda^{\nu_1}_{m_1}$, $\varLambda^{\nu_2}_{m_2}$ 为相因子，所以上式可改写成

$$C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\widetilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\widetilde{m}_2}=\eta^{\nu\tau}_m\varLambda^{\nu_1}_{m_1}\varLambda^{\nu_2}_{m_2}\sum_{\tau'}a_{\tau\tau'}C^{\nu\tau'm}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}.\tag{4-100b}$$

如果 ν_1, ν_2 不同时都为自轭表示，即对于$[\tilde{\nu}_1]\neq[\nu_1]$或$[\tilde{\nu}_2]\neq[\nu_2]$的情形，则总可选择 CG 系数使满足对称性

$$C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2}=\eta^{\nu\tau}_m \Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_2}_{m_2}C^{\nu\tau m}_{\nu_1 m_1,\nu_2 m_2}. \tag{4-101}$$

现在来证明 $\eta^{\nu\tau}_m$ 为和 m 无关而只和 ν_1, ν_2, ν, τ 有关的相因子

$$\eta^{\nu\tau}_m=\epsilon_2(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\equiv\epsilon_2=\pm 1. \tag{4-102}$$

相继利用 IR 矩阵元的定义以及(4-92a), (4-101), (4-97), (3-287)式得

$$\begin{aligned}\langle\Psi^{[\nu]\tau}_m|p|\Psi^{[\nu]\tau}_{m'}\rangle=D^{(\nu)}_{mm'}(p)&=\sum_{\tilde{m}_1\tilde{m}_2\tilde{m}_1'\tilde{m}_2'}C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2}C^{\nu\tau m'}_{\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1',\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2'}\langle\tilde{m}_1\tilde{m}_2|p|\tilde{m}_1'\tilde{m}_2'\rangle\\&=\eta^{\nu\tau}_m\eta^{\nu\tau}_{m'}\sum_{m_1m_2m_1'm_2'}C^{\nu\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{\nu\tau,m'}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}D^{(\nu_1)}_{m_1m_1'}(p)D^{(\nu_2)}_{m_2m_2'}(p)\\&=\eta^{\nu\tau}_m\eta^{\nu\tau}_{m'}D^{(\nu)}_{mm'}(p),\end{aligned}$$

$$\therefore\quad \eta^{\nu\tau}_m\eta^{\nu\tau}_{m'}=1. \tag{4-103}$$

由于此式对随便那个 m 和 m' 都成立，所以 $\eta^{\nu\tau}_m$ 和 m 无关，并且(4-102)式成立. 于是

$$C^{\nu\tau m}_{\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1,\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2}=\epsilon_4(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_2}_{m_2}C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}. \tag{4-104}$$

相因子 $\epsilon_4=\pm1$, 它只和 ν_1, ν_2, ν 和 τ 有关并由 CG 系数的绝对位相选择决定(见后面(4-123a)式).

利用(4-104)式的对称性，可使 CG 系数的计算几乎减少一半，我们只要计算行的长度大于等于列的长度的 ν_1, ν_2 表示的 CG 系数就够了，行长度小于列长度的那些 ν_1, ν_2 的 CG 系数可用对称性(4-104)式直接求得.

如果$[\tilde{\nu}_1]=[\nu_1]$, $[\tilde{\nu}_2]=[\nu_2]$, 则要分几种情形讨论：

(i) $(\nu_1\nu_2\nu)=1$, 即 IR$[\nu]$只出现一次，这时对称性(4-104)式自然满足.

(ii) $(\nu_1\nu_2\nu)=2$, 这时有两种情形，一是两套系数 $C^{[\nu]\alpha,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$ 和 $C^{[\nu]\beta,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$ 都为"对称"(即(4-104)式中相因子 $\epsilon_4=1$, 对 $\tau=\alpha$, β)或都为"反对称"(即相因子 $\epsilon_4=-1$, 对 $\tau=\alpha$, β), 则计算出来的 CG 系数自动满足(4-104)式. 二是两套系数中既有"对称"成份，又有"反对称"成份，则计算出的 CG 系数一般不会自动满足(4-104)式，但一定可以通过适当的线性组合使得一套系数满足"对称"(即 $\epsilon_4=1$), 另一套系数满足反对称($\epsilon_4=-1$).

(iii) $(\nu_1\nu_2\nu)\geqslant3$, 这时必须根据具体情况进行适当线性组合，才能使 CG 系数满足对称性(4-104)式，见文献[12].

(3) 由于 $C(2)$ 就是对换(12), 所以 $C(2)={}^xC(2){}^\xi C(2)$, 根据

$${}^xC(2)\varphi^{[\nu_1]}_{m_1}(x)=\lambda^{(1)}_2\varphi^{[\nu_1]}_{m_1}(x),\quad {}^\xi C(2)\psi^{[\nu_2]}_{m_2}(\xi)=\lambda^{(2)}_2\psi^{[\nu_2]}_{m_2}(\xi),$$
$$\lambda^{(i)}_2=\pm1,\quad i=1,\ 2.$$

立即有

$$C(2)|m_1m_2\rangle=\lambda_2|m_1m_2\rangle, \tag{4-105}$$
$$\lambda_2=\lambda^{(1)}_2\lambda^{(2)}_2.$$

即乘积基必定是 $C(2)$ 的本征函数. 也就是说，在非耦合表象，$C(2)$已是对角矩阵. 所以计算 CG 系数只要将$(n-2)$个矩阵 $C(3)$, $C(4)$, $\cdots C(n)$同时对角化就行了.

(4) 由$[C(f),\ C(2)]=0$ 得到

$$\langle m_1'm_2'|C(f)C(2)|m_1m_2\rangle=\langle m_1'm_2'|C(2)C(f)|m_1m_2\rangle.$$

所以

$$\lambda_2\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle=\lambda_2'\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle,$$
$$\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle=0,\quad 当\quad \lambda_2\neq\lambda_2'. \tag{4-106}$$

(4-106)表明 $\lambda_2=1$ 的乘积基(记为 $|m_1m_2\rangle_+$)和 $\lambda_2=-1$ 的乘积基(记为 $|m_1m_2\rangle_-$)之间没有耦合. 适当规定乘积基的编号,例如让 $\lambda_2=+1$ 的基编号为 $1, 2, \cdots N_+$, $\lambda_2=-1$ 的基编号为 $N_++1, \cdots N_++N_-$,则所有的类算符均取准对角形式,

$$C(f)=\left(\begin{array}{c|c} C^{(+)}(f) & 0 \\ \hline 0 & C^{(-)}(f) \end{array}\right), \quad f=3, 4, \cdots, n, \tag{4-107}$$

$$C^{(\pm)}(f)=\|\langle m_1'm_2'|C(f)|m_1m_2\rangle_\pm\|_1^{N_\pm}. \tag{4-108}$$

于是计算 CG 系数的问题归结为将 $(n-2)$ 个 $N_+\times N_+$ 和 $N_-\times N_-$ 的矩阵分别同时对角化,这样不但大大简化了 CG 系数的计算,而且给 CG 系数列表也带来了很大方便,每一个 CG 系数表都可根据 $\lambda_2=\pm1$ 分解成两个分表列出,见 § 4.13.

例 1 S_3 群 CG 系数

S_3 群有三个 IR, [3]、[21]和[1^3]. 由(4-90)式可知只需计算[21]×[21]的 CG 系数. 根据置换群标准基的编码有

$$\varphi_1^{[21]}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \quad \lambda_2^{(1)}=1; \quad \varphi_2^{[21]}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \quad \lambda_2^{(1)}=-1.$$

(4-108)式中 $\qquad |m_1m_2\rangle=\varphi_{m_1}^{[21]}\psi_{m_2}^{[21]}$.

乘积基顺序取为 $|11\rangle$, $|22\rangle$, $|12\rangle$, $|21\rangle$. 容易看出前两个基的"宇称"为正;后两个基的"宇称"为负. 利用表 4·4-2 中[21]表示的矩阵元,根据(4-94)式容易算出 $\boldsymbol{C}(3)$ 在非耦合表象中的矩阵

$$C(3)=\left(\begin{array}{cc|cc} 3/2 & 3/2 & 0 & \\ 3/2 & 3/2 & & \\ \hline 0 & & -3/2 & 3/2 \\ & & 3/2 & -3/2 \end{array}\right). \tag{4-109}$$

由 $\boldsymbol{C}(3)$ 的特征方程可定出 $\boldsymbol{C}(3)$ 的四个本征值 $\lambda_3=3, 0, 0, -3$. 和图 4·5-3 对照可知 CG 序列为

$$[21]\times[21]=[3]+[21]+[1^3]. \tag{4-110}$$

将本征值 λ_3 代入 $C(3)$ 的本征方程即可解得 CG 系数,因而也就求得了耦合基(4-92a)式

$$\Psi_1^{(3)}=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(|11\rangle+|22\rangle),$$

$$\begin{cases}\Psi_1^{(0)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(|11\rangle-|22\rangle), \\ \Psi_{-1}^{(0)}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=-\sqrt{\frac{1}{2}}(|12\rangle+|21\rangle),\end{cases}$$

$$\Psi_{-1}^{(-3)}=\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(|12\rangle-|21\rangle).$$

由此可见 $\Psi^{[3]}$ 和 $\Psi^{[21]}$ 属于对称乘积(见 § 3·14), $\Psi^{[1^3]}$ 属于反对称乘积,表 4.13 中用$[\nu]_s$ 和$[\nu]_a$分别表示对称和反对称乘积,如(4-110)式可写成

$$[21]\times[21]=[3]_s+[21]_s+[1^3]_a.$$

习　　题

1．计算[31]×[31]的 CG 系数．

例 2　求 S_4 群[31]×[22]的 CG 系数

将乘积基 $|m_1m_2\rangle=\varphi_{m_1}^{[31]}\psi_{m_2}^{[22]}$ 的顺序取为

$$|m_1m_2\rangle=|11\rangle,\ |21\rangle,\ |32\rangle;\ |12\rangle,\ |22\rangle,\ |31\rangle.$$

(置换群标准基的编码见表 4·4–1)．前三者属 $\lambda_2=+1$，后三者属 $\lambda_2=-1$．

利用表 4·4–2 中[31]和[22]表示矩阵元，根据(4–94)式容易算出 $\boldsymbol{C}(3)$和 $\boldsymbol{C}(4)$的矩阵

$$\boldsymbol{C}(4)=\left(\begin{array}{ccc|ccc} 0 & \sqrt{2} & -\sqrt{2} & & & \\ \sqrt{2} & 1 & 1 & & 0 & \\ -\sqrt{2} & 1 & 1 & & & \\ \hline & & & 0 & -\sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ & 0 & & -\sqrt{2} & -1 & 1 \\ & & & -\sqrt{2} & 1 & -1 \end{array}\right),$$

$$\boldsymbol{C}(3)=\left(\begin{array}{ccc|ccc} 0 & 0 & 0 & & & \\ 0 & 3/2 & 3/2 & & 0 & \\ 0 & 3/2 & 3/2 & & & \\ \hline & & & 0 & 0 & 0 \\ & 0 & & 0 & -3/2 & 3/2 \\ & & & 0 & 3/2 & -3/2 \end{array}\right). \tag{4-111}$$

由 $\boldsymbol{C}(4)$的特征方程得

$$\det\|\boldsymbol{C}(4)-\lambda_4 I\|=(\lambda_4-2)^3(\lambda_4+2)^3=0.$$

和表 3·2–1 对照可知

$$[31]\times[22]=[31]+[211].$$

解出 $\boldsymbol{C}(4)$, $\boldsymbol{C}(3)$的本征方程就可求得表 4·13–2b 所列的 CG 系数．

机器计算置换群 CG 系数

以上给出了两个手算例子．这种手算方法有两个缺点：一、是不能保证同一个 $IR[\nu]$ 的各 m 分量之间满足 Yamanouchi 相对位相约定(4–14b)式．二、是由于 n 增加时，S_n 群的不可约表示的维数迅速增加，因此手算十分困难．利用机器计算可克服上述缺点．现将主要步骤列在下面．

1．根据$[\nu_1]$，$[\nu_2]$，由已知的 CG 序列(如表 4·10–1 或见 Itzykson 给出的表)及表 4·4-1，定出每一个可能出现的 $IR[\nu]$ 的第一分量所对应的本征值 $\lambda=k_n\lambda_n+\cdots+k_3\lambda_3$．

2．按 λ_2 值将乘积基分成两组，并计算 $\boldsymbol{C}^{(+)}(f)$的矩阵元(4–108)式．因为除了 $IR[1^n]$ 外，任一 IR 的第一分量的 $\lambda_2=1$，而 $IR[1^n]$的 CG 系数十分简单，不必计算[见(4–124)式]，所以只需计算 $\boldsymbol{C}^{(+)}(f)$就够了．

3．作出矩阵

$$\boldsymbol{M}^{(+)}=k_n\boldsymbol{C}^{(+)}(n)+\cdots+k_3\boldsymbol{C}^{(+)}(3). \tag{4-112a}$$

根据步骤 1 定出的 λ，解代数方程

$$(\boldsymbol{M}^{(+)}-\lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{U}^{\tau}=0, \quad \tau=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu_1\nu_2\nu), \tag{4-112b}$$

就可得到第 τ 个 $IR(\nu)$ 的第一分量的 CG 系数. (4-112b)式中的 $\boldsymbol{U}^{\tau}=\{C^{[\nu]\tau,m=1}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\}$ 为列矢量，m_1m_2 为列矢量的分量指标.

4. 绝对位相约定.

第一分量的 CG 系数 $\boldsymbol{U}^{\tau}$ 的位相选取决定于绝对位相约定. 原则上说，绝对位相可以任意选取. 我们采用以下的绝对位相约定：先规定乘积基 $|m_1, m_2\rangle$ 的编号为 $|1, 1\rangle$, $|1,2\rangle$, $\cdots|1, h_{\nu_2}\rangle$, $|2, 1\rangle\cdots|2, h_{\nu_2}\rangle\cdots|h_{\nu_1}, h_{\nu_2}\rangle$. 然后规定 $\boldsymbol{U}^{\tau}$ 的头一个非零分量为正值. 即要求

$$C^{[\nu]\tau,1}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\big|_{(m_1,m_2)=\min}>0. \tag{4-113}$$

5. 将 $\Psi^{[\nu]\tau}_m=\sum_{cd} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1c,\nu_2d}|cd\rangle$ 代入(4-35)式，然后将该式左乘 $\langle ab|$ 得：

$$C^{\nu_\tau m'}_{\nu_1a,\nu_2b}=\frac{1}{D^{(\nu)}_{m'm}(T)}\sum_{cd}\left[D^{(\nu_1)}_{ac}(T)D^{(\nu_2)}_{bd}(T)-D^{(\nu)}_{mm}(T)\delta_{ac}\delta_{bd}\right]C^{\nu_\tau m}_{\nu_1c,\nu_2d}. \tag{4-114}$$

利用上式并选择合适的相邻对换，就可由 $IR[\nu]\tau$ 的第一分量求出所有其余分量. 这样所得的 CG 系数自动满足 Young-Yamanouchi 相对位相.

我们用以上方法编写了程序[12]，计算了 S_3-S_6 群的 CG 系数，S_2-S_5 群的 CG 系数列在 § 4·13, S_6 群的 CG 系数表见文献[12].

置换群 CG 系数的另一计算方法见 § 4·19.

习　　题

1. 计算 S_4 群[31]×[31]的 CG 系数.

§ 4.12　置换群 CG 系数的性质

置换群 CG 系数除了一般 CG 系数所满足的一些性质(见 § 3·18)外，还有一些特有的性质. 利用这些性质，可以减少所需计算的 CG 系数的个数，或检验算出的 CG 系数的正确性.

(1) 幺正性

$$\begin{gathered}\sum_{m_1m_2} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu']\tau',m'}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{mm'},\\ \sum_{\nu\tau m} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2'}=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\ .\end{gathered} \tag{4-115}$$

(2)
$$C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\epsilon_1(\nu_1\nu_2\nu_\tau)C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_2m_2,\nu_1m_1}. \tag{4-116a}$$

根据绝对位相约定(4-113)，可知

$$\epsilon_1(\nu_1\nu_2\nu_\tau)=\operatorname{sign}\left(C^{[\nu]\tau,1}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}\big|_{(m_2m_1)=\min}\right) \tag{4-116b}$$

上式表示 ϵ_1 取 (m_2m_1) 编号为最小时的非零 CG 系数的符号. 当 $\nu_1=\nu_2$ 时令

$$\delta_{\nu_\tau}=\epsilon_1(\nu_1\nu_1\nu_\tau). \tag{4-116c}$$

如果 $\delta_{\nu_\tau}=1(-1)$ 则 $IR[\nu]_\tau$ 属于对称乘积 $[(\nu_1)\times(\nu)]_s$(反对称乘积 $[(\nu_1)\times(\nu_1)]_a$).

(3) 由(3-327b)得

$$\frac{1}{\sqrt{h_\nu}}C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}=\epsilon_2(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\frac{1}{\sqrt{h_{\nu_1}}}C^{[\nu_1]\tau,m_1}_{\nu m,\nu_2m_2}=\epsilon_3(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\frac{1}{\sqrt{h_{\nu_2}}}C^{[\nu_2]\tau,m_2}_{\nu_1m_1,\nu m}. \tag{4-117}$$

相因子

$$\epsilon_2(\nu_1\nu_2\nu_\tau)=\operatorname{sign}\left(C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_11,\nu_2m_2}\big|_{(mm_2)=\min}\right), \tag{4-118}$$

$$\epsilon_3(\nu_1\nu_2\nu_\tau) = \mathrm{sign}(C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1,\nu_2 1}\big|_{(m_1 m)=\min}). \tag{4-119}$$

(4) 由(4-116)和(4-117)得到

$$C^{[\nu_1]\tau,m_1}_{\nu m,\nu_1 m_2} = \delta_{\nu_\tau} C^{[\nu_1]\tau,m_2}_{\nu m,\nu_1 m}. \tag{4-120}$$

这里 $\delta_{\nu_\tau} = \epsilon_1(\nu\nu\nu_\tau)$.

(5)
$$C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1,\nu_2 m_2} = \epsilon_4(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_2}_{m_2}C^{[\nu]\tau m}_{\tilde{\nu}_1 m_1,\tilde{\nu}_2 m_2} = \epsilon_5(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu}_{m}C^{[\tilde{\nu}]\tau,\tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1,\nu_2 m_2}$$

$$= \epsilon_6(\nu_1\nu_2\nu_\tau)\Lambda^{\nu_2}_{m_2}\Lambda^{\nu}_{m}C^{[\tilde{\nu}]\tau,\tilde{m}}_{\nu_1 m_1,\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2}, \tag{4-121}$$

$$\epsilon_4(\nu_1\nu_2\nu_\tau) = \mathrm{sign}(\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_2}_{m_2}C^{[\nu]\tau,1}_{\nu_1 m_1,\nu_2 m_2}\big|_{(m_1 m_2)=\max}), \tag{4-122a}$$

$$\epsilon_5(\nu_1\nu_2\nu_\tau) = \mathrm{sign}(\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu}_{m}C^{[\nu]\tau h_\nu}_{\nu_1,h_{\nu_1}+1-m_1;\nu_2 m_2}\big|_{(m_1 m_2)=\min}), \tag{4-122b}$$

$$\epsilon_6(\nu_1\nu_2\nu_\tau) = \mathrm{sign}(\Lambda^{\nu_2}_{m_2}\Lambda^{\nu}_{m}C^{[\nu]\tau,h_\nu}_{\nu_1 m_1;\nu_2,h_{\nu_2}+1-m_2}\big|_{(m_1 m_2)=\min}), \tag{4-123}$$

这里(4-122a)代表取(m_1m_2)的编号为最大的非零 CG 系数的符号,等等.

如果$[\nu_1]$, $[\nu_2]$, $[\nu]$中有一个为全对称表示$[n]$或全反对称表示$[1^n]$时,CG 系数特别简单. 由(4-90)式及对称性(4-116)、(4-122)式得到.

$$\begin{aligned}
&C^{[\nu]m}_{[\nu_1]m_1,[n]1} = \delta_{\nu\nu_1}\delta_{mm_1}.\\
&C^{[n],1}_{[\nu_1]m_1,[\nu_2]m_2} = \frac{1}{\sqrt{h_{\nu_1}}}\,\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{m_1m_2}.\\
&C^{[\tilde{\nu}]\tilde{m}}_{[\nu_1]m_1,[1^n]1} = \Lambda^{\nu_1}_{m_1}\delta_{\nu_1\nu}\delta_{m_1m}.\\
&C^{[1^n]1}_{[\nu_1]m_1,[\tilde{\nu}_2]\tilde{m}_2} = \frac{1}{\sqrt{h_{\nu_1}}}\,\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\delta_{\nu_1\nu_2}\delta_{m_1m_2}.
\end{aligned} \tag{4-124}$$

由上式得到全对称态和全反对称态的展开式

$$\begin{aligned}
&\Psi^{[n]} = \frac{1}{\sqrt{h_\nu}}\sum_m \varphi^{[\nu]}_m(x)\psi^{[\tilde{\nu}]}_m(\xi),\\
&\Psi^{[1^n]} = \frac{1}{\sqrt{h_\nu}}\sum_m \Lambda^{\nu}_m\varphi^{[\nu]}_m(x)\psi^{[\tilde{\nu}]}_{\tilde{m}}(\xi).
\end{aligned} \tag{4-125}$$

由§4·13的系数表可检验以上对称性,如利用 S_5 群 CG 系数表 4·13-3e 和 3f 有:

检验(4-117)式:

$$\sqrt{\frac{1}{6}}\,C^{[311]\tau,2}_{[311]1,[32]2} = \sqrt{\frac{1}{5}}\,C^{[32]\tau,2}_{[311]1,[311]2},\quad \sqrt{\frac{1}{6}}\begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{1}{10}}\\ -\sqrt{\frac{1}{60}}\end{pmatrix} = \sqrt{\frac{1}{5}}\begin{pmatrix}-\sqrt{\frac{1}{12}}\\ -\sqrt{\frac{1}{72}}\end{pmatrix},\quad \tau = \begin{matrix}\alpha\\ \beta\end{matrix}.$$

检验(4-122)式:

$$C^{[221]\tau,5}_{[311]1,[311]6} = C^{[\widetilde{32}]\tau,\tilde{1}}_{[311]1,[\widetilde{311}]\tilde{1}} = \epsilon_6\Lambda^{[32]}_1\Lambda^{[311]}_1C^{[32]\tau 1}_{[311]1,[311]1} = \begin{pmatrix}\sqrt{\frac{4}{12}}\\ -\sqrt{\frac{4}{72}}\end{pmatrix},\quad \tau = \begin{matrix}\alpha\\ \beta\end{matrix}.$$

§4.13 S_3-S_5 置换群 CG 系数表

对置换群 CG 系数表 4·13-1 至 4·13-3 作以下说明.

1. 每个表按 $\lambda_2 = \pm 1$ 分成两个分表, $\lambda_2 = 1(-1)$的在每个表的上半(下半)部分.

2. 表的第二列 N 为归一系数，表中给出的数值为 CG 系数的平方值，带 * 号者表示该系数为负数，空白处表示该值为零．例如由表 4·13–3b

$$C^{[41]2}_{[41]3,[32]2}=\left\langle\begin{matrix}1235\\4\end{matrix}\middle|\begin{matrix}1245\\3\end{matrix}\ \begin{matrix}124\\,35\end{matrix}\right\rangle=-\sqrt{\frac{1}{45}}.$$

3. 每个表既可横读，也可纵读，例如由表 4·13–3b 得

$$\Psi^{[41]}_2=\sqrt{\frac{1}{45}}\left(\sqrt{15}\,\varphi^{[41]}_1\psi^{[32]}_1+\sqrt{4}\,\varphi^{[41]}_2\psi^{[32]}_1-\varphi^{[41]}_3\psi^{[32]}_2+\sqrt{12}\,\varphi^{[41]}_3\psi^{[32]}_4\right.$$
$$\left.-\varphi^{[41]}_4\psi^{[32]}_3+\sqrt{12}\,\varphi^{[41]}_4\psi^{[32]}_5\right),$$

$$\varphi^{[41]}_1\psi^{[32]}_4=-\sqrt{\frac{18}{48}}\,\Psi^{[32]}_4+\sqrt{\frac{10}{16}}\,\Psi^{[221]}_1=-\sqrt{\frac{3}{8}}\,\Psi^{[32]}_4+\sqrt{\frac{5}{8}}\,\Psi^{[221]}_1.$$

4. 分表 3e, 3f 中，α, β 分别代表 $\tau=\alpha$, β, 如[311α]代表[311]$\tau=\alpha$, [311β]代表[311]$\tau=\beta$.

5. 利用 § 4·12 给出的对称性，可得到另外一些 CG 系数值．Λ^{ν}_{m} 值见表 4·4–1.

6. 我们在文献[12]中给出的 S_3–S_6 群 CG 系数，对绝对位相未作任何规定．如果采用本书的位相约定，则文献[12]的 CG 系数表中，对以下$[\nu_1][\nu_2][\nu]\tau$ 的所有系数都需乘以因子 $\theta(\nu_1\nu_2\nu_\tau)=-1$.

表号	$[\nu_1]$	$[\nu_2]$	$[\nu]\tau$	表号	$[\nu_1]$	$[\nu_2]$	$[\nu]\tau$	表号	$[\nu_1]$	$[\nu_2]$	$[\nu]\tau$
1.1	[21]	[21]	[3]	4.1	[51]	[51]	[51]	4.9	[42]	[411]	$[31^3]$
			[21]				[42]	4.10	[411]	[411]	[411]
2.1	[31]	[31]	[31]				[411]				[321α]
2.3	[22]	[22]	[22]	4.2	[51]	[42]	[42]				[321β]
3.1	[41]	[41]	[41]				[411]				[222]
			[32]				[33]	4.11	[51]	[321]	[411]
			[311]				[321]				[321β]
3.4	[32]	[32]	[41]	4.4	[51]	[33]	[321]				[222]
			[32]	4.5	[33]	[33]	[42]	4.12	[33]	[321]	[411]
			$[21^3]$	4.6	[42]	[33]	[33]				[321α]
3.5	[311]	[32]	[221]	4.7	[411]	[33]	$[2^3]$				[321β]
			$[21^3]$	4.8	[42]	[42]	[51]	4.13	[42]	[321]	[321α]
3.6	[311]	[311]	[41]				[411]	4.14	[411]	[321]	[321α]
			[311]				[321α]				[321γ]
			[221β]				[222]				

表 4·13 置换群 CG 系数表

S_3 1 $[21]\times[21]=[3]_s+[21]_s+[1^3]_a$

	N	(11)	(22)
[3]	2	1	1
[21]1	2	1	*1
		(12)	(21)
[21]2	2	*1	*1
$[1^3]$	2	1	*1

S_4 2a $[31]\times[31]=[4]_s+[31]_s+[22]_s+[211]_a$

	N	(11)	(12)	(21)	(22)	(33)
[4]	3	1			1	1
[31]1	6	4			*1	*1
2	6		*1	*1	2	*2
[22]1	6		2	2	1	*1
[211]1	2		1	*1		
		(13)	(31)	(23)	(32)	
[31]3	6	*1	*1	*2	*2	
[22]2	6	2	2	*1	*1	
[211]2	2	1	*1			
3	2			1	*1	

注 1. $[\nu]_s$ 代表该表示属于对称乘积$[[\nu_1]\times[\nu_1]]_s$, $[\nu]_a$ 代表该表示属于反对称乘积$[[\nu_1]\times[\nu_1]]_a$.

2. N 为归一系数，* 代表系数值为负．如表 3b 中，$C^{[41]2}_{[41]3[32]2}=-\sqrt{\frac{1}{45}}$.

续表

S_4 2b [31]×[22]=[31]+[211]

	N	(11)	(21)	(32)
[31]1	2		1	1
2	4	2	1	*1
[211]1	4	2	*1	1
		(12)	(22)	(31)
[31]3	4	2	*1	*1
[211]2	4	2	1	1
3	2		*1	1

S_4 2c [22]×[22]=$[4]_s$+$[22]_s$+$[1^4]_a$

	N	(11)	(22)
[4]	2	1	1
[22]1	2	1	*1
		(12)	(21)
[22]2	2	*1	*1
$[1^4]$	2	1	*1

S_5 3a [41]×[41]=$[5]_s$+$[41]_s$+$[32]_s$+$[311]_a$

	N	(11)	(12)	(13)	(21)	(22)	(23)	(31)	(32)	(33)	(44)
[5]	4	1				1				1	1
[41]1	12	9				*1				*1	*1
2	36		*3		*3	20				*5	*5
3	36			*3			*5	*3	*5	10	*10
[32]1	36		15		15	4				*1	*1
2	36			15			*1	15	*1	2	*2
4	6						2		2	1	*1
[311]1	2		1		*1						
2	2			1				*1			
4	2						1		*1		
		(14)	(24)	(34)	(41)	(42)	(43)				
[41]4	36	*3	*5	*10	*3	*5	*10				
[32]3	36	15	*1	*2	15	*1	*2				
5	6		2	*1		2	*1				
[311]3	2	1			*1						
5	2		1			*1					
6	2			1			*1				

S_5 3b [41]×[32]=[41]+[32]+[311]+[221]

	N	(11)	(12)	(14)	(21)	(22)	(24)	(31)	(32)	(34)	(43)	(45)
[41]1	3				1				1		1	
2	45	15			4				*1	12	*1	12
3	45		15			*1	12	*1	2	6	*2	*6
[32]1	72	12			20				*5	*15	*5	*15
2	144		24			*10	*30	*10	20	*15	*20	15
4	48			*18		*10		*10	*5		5	
[311]1	40	20			*12				3	*1	3	*1
2	80		40			6	*2	6	*12	*1	12	1
4	16					*2	6	2		*3		3
[221]1	16			10		*2		*2	*1		1	
3	16					6	2	*6		*1		1
		(13)	(15)	(23)	(25)	(33)	(35)	(41)	(42)	(44)		
[41]4	45	15		*1	12	*2	*6	*1	*2	*6		
[32]3	144	24		*10	*30	*20	15	*10	*20	15		
5	48		*18	*10		5		*10	5			
[311]3	80	40		6	*2	12	1	6	12	1		
5	16			*2	6		3	2		3		
6	8					*1	*3		1	3		
[221]2	16		10	*2		1		*2	1			
4	16			6	2		1	*6		1		
5	8					3	*1		*3	1		

续表

S_5 3c [311]×[41]=[41]+[32]+[311]+[221]+[21³]

	N	(11)	(12)	(13)	(21)	(22)	(23)	(34)	(41)	(42)	(43)	(54)	(64)
[41]1	3		1				1	1					
2	3	*1									1	1	
3	3				*1					*1			1
[32]1	48	20	*12				3	3			5	5	
2	48			3	20	3	*6	6		*5			5
4	96			*2		*2	*1	1		30	*15	15	30
[311]1	48	12	20				*5	*5			3	3	
2	48			*5	12	*5	10	*10		*3			3
4	48			3		*3			*12	5	10	*10	5
[221]1	96			30		30	15	*15		2	*1	1	2
3	48			*5		5			20	3	6	*6	3
[21³]1	3			1		*1			1				
		(14)	(24)	(31)	(32)	(33)	(44)	(51)	(52)	(53)	(61)	(62)	(63)
[41]4	3			*1					*1				*1
[32]3	48	3	6	20	3	6			*5				*5
5	96	*2	1		*2	1	15		30	15			*30
[311]3	48	*5	*10	12	*5	*10			*3				*3
5	48	3			*3		*10	*12	5	*10			*5
6	48		3			*3	5			*5	*12	*20	
[221]2	96	30	*15		30	*15	1		2	1			*2
4	48	*5			5		*6	20	3	*6			*3
5	48		*5			5	3			*3	20	*12	
[21³]2	3	1			*1			1					
3	3		1			*1					1		
4	3						1			*1		1	

S_5 3d $[32]\times[32]=[5]_s+[41]_s+[32]_s+[311]_a+[221]_s+[21^3]_a$

	N	(11)	(12)	(14)	(21)	(22)	(24)	(33)	(35)	(41)	(42)	(44)	(53)	(55)
[5]	5	1				1		1				1		1
[41]1	30	4				4		4				*9		*9
2	18	4				*1	*3	*1	*3		*3		*3	
3	36		*2	*6	*2	4	*3	*4	3	*6	*3		3	
[32]1	36	16				*4	3	*4	3		3		3	
2	72		*8	6	*8	16	3	*16	*3	6	3		*3	
4	24		2		2	1		*1				9		*9
[311]1	4						1		1		*1		*1	
2	8			2			1		*1	*2	*1		1	
4	40		8	6	*8		*3		3	*6	3		*3	
[221]1	8		2		2	1		*1				*1		1
3	8			2			*1		1	2	*1		1	
[21³]1	20		6	*2	*6		1		*1	2	*1		1	
		(13)	(15)	(23)	(25)	(31)	(32)	(34)	(43)	(45)	(51)	(52)	(54)	
[41]4	36	*2	*6	*4	3	*2	*4	3	3		*6	3		
[32]3	72	*8	6	*16	*3	*8	*16	*3	*3		6	*3		
5	24	2		*1		2	*1			*9			*9	
[311]3	8		2		*1			*1	1		*2	1		
5	40	8	6		3	*8		3	*3		*6	*3		
6	20			4	*3		*4	3	*3			3		
[211]2	8	2		*1		2	*1			1			1	
4	8		2		1			1	1		2	1		
5	4				*1			1	1			*1		
[21³]2	20	6	*2		*1	*6		*1	1		2	1		
3	10			3	1		*3	*1	1			*1		
4	2									1			*1	

S_5 3e [311]×[32]=[41]+[32]+[311]^2+[221]+[21^3]

	N	(11)	(12)	(14)	(21)	(22)	(24)	(33)	(35)	(41)	(42)	(44)	(53)	(55)	(63)	(65)
[41]1	3	1				1		1								
2	60	*12				3	*1	3	*1		*5	15	*5	15		
3	120		6	*2	6	*12	*1	12	1	10		*15		15	*10	*30
[32]1	24						5		5		4	3	4	3		
2	48			10			5		*5	*8		*3		3	8	*6
4	48		*10		*10	*5		5		*6	3		*3		*6	
[311α]1	40	16				*4	*3	*4	*3			5		5		
2	80		*8	*6	*8	16	*3	*16	3			*5		5		*10
4	80			10			*5		5	*8	*16	3	16	*3	*8	*6
[311β]1	60	4				*1	12	*1	12		*15		*15			
2	60		*1	12	*1	2	6	*2	*6	15					*15	
4	60		*15		15					1	2	6	*2	*6	1	*12
[221]1	48		6		6	3		*3		*10	5		*5		*10	
3	48		8	*6	*8		3		*3			5		*5		*10
[21^3]1	120		10	30	*10		*15		15	6	12	1	*12	*1	6	*2

	N	(13)	(15)	(23)	(25)	(31)	(32)	(34)	(43)	(45)	(51)	(52)	(54)	(61)	(62)	(64)
[41]4	120	6	*2	12	1	6	12	1		15	10		15		10	30
[32]3	48		10		*5			*5		3	*8		3		*8	6
5	48	*10		5		*10	5		*3		*6	*3			6	
[311α]3	80	*8	*6	*16	3	*8	*16	3		5			5			10
5	80		10		5			5	16	*3	*8	16	*3		8	6
6	40				*5			5	*4	*3		4	3	16		
[311β]3	60	*1	12	*2	*6	*1	*2	*6			15				15	
5	60	*15				15			*2	*6	1	*2	*6		*1	12
6	60			*15			15		1	*12		*1	12	*4		
[221]2	48	6		*3		6	*3		*5		*10	*5			10	
4	48	8	*6		*3	*8		*3		*5			*5			10
5	24			4	3		*4	*3		*5			5			
[21^3]2	120	10	30		15	*10		15	*12	*1	6	*12	*1		*6	2
3	60			5	*15		*5	15	3	*1		*3	1	*12		
4	3								*1			1		*1		

续表

S_6 3f $[311]\times[311]=[5]_s+[41]_s+[32]^2_s+[311]_a+[221\alpha]_s+[221\beta]_a+[21^3]_a+[1^5]_s$

	N	(11)	(12)	(14)	(21)	(22)	(24)	(33)	(35)	(36)	(41)	(42)	(44)	(53)	(55)	(56)	(63)	(65)	(66)
[5]	6	1				1		1					1		1				1
[41] 1	6	1				1		1					*1		*1				*1
2	72	20				*5	*3	*5	*3			*3	5	*3	5				*20
3	72		*5	3	*5	10		*10		*3	3		10		*10	*5	*3	*5	
[32α] 1	12	4				*1		*1					*1		*1				4
2	12		*1		*1	2		*2					*2		2	1		1	
4	96		*6	10	*6	*3	*5	3	5	10	10	*5	3	5	*3	6	10	6	
[32β] 1	72	4				*1	15	*1	15			15	1	15	1				*1
2	72		*1	*15	*1	2		*2		15	*15		2		*2	*1	15	*1	
4	12		2		2	1		*1					1		*1	2		2	
[311] 1	4						1		1			*1		*1					
2	4			*1						1	1						*1		
4	4		1		*1											1		*1	
[221α] 1	96		10	6	10	5	*3	*5	3	6	6	*3	*5	3	5	*10	6	*10	
3	12			*1			*2		2	*1	*1	*2		2			*1		
[221β] 1	12			2			*1		1	2	*2	1		*1			*2		
3	72		*15	1	15		2		*2	1	*1	*2		2		15	*1	*15	
[21³] 1	72		3	5	*3		10		*10	5	*5	*10		10		*3	*5	3	
		(13)	(15)	(16)	(23)	(25)	(26)	(31)	(32)	(34)	(43)	(45)	(46)	(51)	(52)	(54)	(61)	(62)	(64)
[41] 4	72	*5	3		*10		3	*5	*10			*10	5	3		*10		3	5
[32α] 3	12	*1			*2			*1	*2			2	*1			2			*1
5	96	*6	10		3	5	*10	*6	3	5	5	*3	*6	10	5	*3		*10	*6
[32β] 3	72	*1	*15		*2		*15	*1	*2			*2	1	*15		*2		*15	1
5	12	2			*1			2	*1			*1	*2			*1			*2
[311] 3	4		*1				*1							1				1	
5	4	1						*1					*1						1
6	4				1				*1			1				*1			
[221α] 2	96	10	6		*5	3	*6	10	*5	3	3	5	10	6	3	5		*6	10
4	12		*1			2	1			2	2			*1	2			1	
5	12			4		1				*1	*1				1		4		
[221β] 2	12		2			1	*2			1	*1			*2	*1			2	
4	72	*15	1			*2	*1	15		*2	2		*15	*1	2			1	15
5	72			*4	*15	*1			15	1	*1	15			1	*15	4		
[21³] 2	72	3	5			*10	*5	*3		*10	10		3	*5	10			5	*3
3	72			*20	3	*5			*3	5	*5	*3			5	3	20		
4	6			1		*1				1	*1				1		*1		
[1⁵]	6			1		*1				1	1				*1		1		

§4.14 置换群的外积，Littlewood 规则

假如有两群粒子，其编号分别为 1, 2, …, n_1 和 n_1+1, …, $n_1+n_2=n$，它们分别构成置换群 $S_{n_1}=S_{n_1}(1\cdots n_1)$ 和 $S'_{n_2}=S_{n_2}(n_1+1\cdots n)$ 的对象. S_{n_1} 和 S'_{n_2} 的标准基表为：

$$\begin{aligned}\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1)&=\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1^0)=|Y_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1^0)\rangle,\\ \psi_{m_2}^{[\nu_2]}(n_1+1,\ \cdots,\ n)&=\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2^0)=|Y_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2^0)\rangle.\end{aligned}\tag{4-126}$$

$$(\omega_1^0)=(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1),\quad (\omega_2^0)=(n_1+1,\ \cdots,\ n),$$

$$m_1=1,\ 2,\ \cdots,\ h_{\nu_1},\quad m_2=1,\ 2,\ \cdots,\ h_{\nu_2}.$$

式中 h_{ν_i} 为 $IR[\nu_i]$ 的维数，$Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\omega_i^0)$ 代表一个杨盘，ω_i^0 代表其中填的数字. 它们的积记为：

$$|m_1m_2\omega^0\rangle=\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1^0)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2^0)=|Y_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1^0)Y_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2^0)\rangle,\tag{4-127}$$

$$(\omega^0)=(\omega_1^0,\ \omega_2^0)=(1,\ 2,\ \cdots n).$$

例如

$$|Y_1^{[21]}(123)\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle,\quad |Y_2^{[21]}(456)\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 4&6\\\hline 5\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle.$$

定义 $h_3=\begin{pmatrix}n\\n_1\end{pmatrix}$ 个正序列：

$$(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2),\quad (\omega_1)=(a_1a_2\cdots a_{n_1}),\quad (\omega_2)=(a_{n_1+1}\cdots a_n),\tag{4-128}$$

$$a_1<a_2<\cdots<a_{n_1},\quad a_{n_1+1}<a_{n_1+2}<\cdots<a_n,$$

式中 a_i 代表 1, 2, …, n 中的任一个数. 例如 $n_1=3$, $n_2=2$, $h_3=\begin{pmatrix}5\\3\end{pmatrix}=10$，这 10 个正序列为：

表 4·14-1 正序列(ω)及其序号 ω 和宇称 $\delta\omega$[1)]

ω ($\delta\omega$)	1(+)	2(−)	3(+)	4(−)	5(+)	6(−)	7(+)	8(+)	9(−)	10(+)
(ω)	(123, 45)	(124, 35)	(134, 25)	(234, 15)	(125, 34)	(135, 24)	(235, 14)	(145, 23)	(245, 13)	(345, 12)

正序列的顺序是这样规定的，把(ω)中的(ω_1)部分看作一个 n_1 维矢量，如果两个正序列(ω)和($\overline{\omega}$)中，$(\omega_1)-(\overline{\omega}_1)$ 的倒数第一个非零分量小于零，则认为 $(\omega)<(\overline{\omega})$. 这样规定的目的是使得$[\nu_1]$为全对称表示$[n_1]$时，Gelfand 基 $\psi^{[n_1]}(\omega_1)$ 的编号次序和 §7·4 的约定相一致.

现在证明下面 $N=h_{\nu_1}h_{\nu_2}h_3$ 个基矢荷载 $S_{n_1+n_2}$ 群的一个表示：

$$|m_1m_2\omega\rangle=\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2)=|Y_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1)Y_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2)\rangle,\tag{4-129}$$

$$m_i=1,\ 2,\ \cdots,\ h_{\nu_i},\quad \omega=1,\ 2,\ \cdots,\ h_3.$$

式中 $Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\omega_i)$ 称为广义杨盘，它是标准杨盘 $Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\omega_i^0)$ 中将数字 j 换成 a_j 而得到的. 显然它具有下列性质：

(1) 盘中填的数字无论按行、按列均按上升次序排列.

(2) 逐次把数字大的方格去掉，剩下的杨盘代表其子群所属的 IR. 例如

$$Y_{1211}^{[31]}(2357)=\begin{array}{|c|c|c|}\hline 2&3&7\\\hline 5\\\cline{1-1}\end{array}$$

1) 我们对每一个正序列(ω)规定一个置换宇称 δ_ω：从(ω^0)经偶置换到达的(ω)，其宇称 $\delta_\omega=+1$，否则 $\delta_\omega=-1$，显然 $\delta_{\omega^0}=+1$.

属于 $S_4(2357)$ 群的 $IR[31]$，$S_3(235)$ 群的 $IR[21]$，$S_2(12)$ 群的 $IR[2]$. 注意 1211 是 Yamanouchi 数.

证明如下：先定义 $h_3=\begin{pmatrix} n \\ n_1 \end{pmatrix}$ 个保序置换算符 Q_ω，它把正序列 (ω^0) 置换成正序列 (ω)

$$Q_\omega(\omega^0)=(\omega), \quad Q_\omega=\begin{pmatrix} \omega^0 \\ \omega \end{pmatrix}, \tag{4-130a}$$

$$|m_1m_2\omega\rangle=Q_\omega|m_1m_2\omega^0\rangle. \tag{4-130b}$$

S_n 群任一群元 R 可按子群 $S_{n_1}(\omega_1)\times S_{n_2}(\omega_2)$ 作右陪集分解(见(1-25)式)，

$$R=\pi_1\pi_2Q_\omega, \tag{4-131}$$

这里 $\pi_i\in S_{n_i}(\omega_i)$ 群. 让我们来求出置换算符 π_1, π_2. 利用

$$R(\omega^0)=(\tilde{\omega})=\begin{pmatrix} \omega \\ \tilde{\omega} \end{pmatrix}(\omega)=\begin{pmatrix} \omega \\ \tilde{\omega} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \omega^0 \\ \omega \end{pmatrix}(\omega^0)=\begin{pmatrix} \omega \\ \tilde{\omega} \end{pmatrix}Q_\omega(\omega^0). \tag{4-132a}$$

[式中 $(\tilde{\omega})$ 为 (ω^0) 经 R 作用后得到的另一个序列，一般说为非正序列，而 (ω) 为和 $(\tilde{\omega})$ 相对应的一个正序列]，不难看出

$$\begin{pmatrix} \omega \\ \tilde{\omega} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \tilde{\omega}_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \omega_2 \\ \tilde{\omega}_2 \end{pmatrix}=\pi_1\pi_2. \tag{4-132b}$$

例如：$n_1=3$, $n_2=2$, $(\omega^0)=(123,\ 45)$, $R=(153)$, $(\tilde{\omega})=R(\omega^0)=(521,\ 43)$，和 $(\tilde{\omega})$ 相对应的正序列为 $(\omega)=(125,\ 34)$, $Q_\omega=\begin{pmatrix} 123,\ 45 \\ 125,\ 34 \end{pmatrix}=(354)$, $\begin{pmatrix} \omega \\ \tilde{\omega} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 125,\ 34 \\ 521,\ 43 \end{pmatrix}=(15)(34)$, $\pi_1=(15)\in S_3(125)$, $\pi_2=(34)\in S_2(34)$, $R=(153)=\pi_1\pi_2Q_\omega=(15)(34)(354)$.

由(4-131)式和(4-130)式得

$$R|m_1m_2\omega_0\rangle=\sum_{m_1'm_2'}D^{[\nu_1]}_{m_1'm_1}(\pi_1)D^{[\nu_2]}_{m_2'm_2}(\pi_2)|m_1'm_2'\omega\rangle, \tag{4-133}$$

即 S_n 群的所有置换算符作用于乘积基(4-127)的结果总可表为(4-129)式中 N 个基矢的线性组合. 因此这 N 个基矢荷载 S_n 群的一个可约表示. 证毕.

现在进一步研究这 N 个基矢为线性独立的条件. §4·7 中已指出，仅用量子数 $(\nu_i m_i)$ 不足以完全确定基函数 $\psi^{[\nu_i]}_{m_i}$，还需加上 Weyl 盘，因此(4-129)式应完整地写成：

$$|m_1m_2\omega\rangle=\psi^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1,\ W_1)\psi^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2,\ W_2). \tag{4-134}$$

(4-134)的基对不同的 m_1, m_2 一定正交，但对不同的 ω 不一定正交. 但是如果 W_1 盘中的任一态指标都不同于 W_2 盘中的任一态指标，则(4-134)式的基对不同的 ω 也正交. 例如 W_1, W_2 盘分别标志 SU_m 和 SU_n 群的 IR 基时，就是如此(见 §7·12). 在此条件下有：

$$\langle m_1'm_2'\omega'|m_1m_2\omega\rangle=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\delta_{\omega\omega'}, \tag{4-135}$$

即 N 个基矢为正交归一. 当 W_1 盘中的态指标和 W_2 盘中态指标有部分相同时，则线性独立基矢的数目小于 N. 以下讨论外积约化时，始终假定(4-135)式成立. W_1 和 W_2 盘中态指标有相同的情形见 §4·17.

由上面讨论可知，(4-129)式中 N 个基矢荷载 S_n 群的一个 N 维可约表示，称为 $IR[\nu_1]$ 和 $[\nu_2]$ 的外积，如何将它约化成 S_n 群的不可约表示，就是置换群外积约化问题. 在 S_{n_1} 群的 $[\nu_1]$ 和 S_{n_2} 群的 $[\nu_2]$ 的外积中，可能出现 S_n 群的那些 $[\nu]$ 称为外积约化规则，记为

$$[\nu_1]\otimes[\nu_2]=\sum_\nu\{\nu_1\nu_2\nu\}[\nu]. \tag{4-136}$$

这个问题已经由 Littlewood 规则很好地解决了.

Littlewood 规则: (1)首先画出和$[\nu_1]$及$[\nu_2]$相对应的杨图. 原则上可任选其中一个作为基础, 实际上选杨图较复杂的一个作为基础方便些. (2) 然后在第二个杨图中填进字母, 第一行都填 a, 第二行都填 b, …, 等等. (3) 先将带 a 的方格拼到基础杨图上去, 在保证没有两个 a 出现在同一列的前提下, 作出一切可能的扩大了的杨图. (4) 再将 b 按同样规则拼到已扩大了的杨图上去, …, 一直到耗尽第二个杨图为止等等. (5) 最后从右向左逐行读出拼好的杨图中的字母 a, b, c 等等. 要求在每一步读出的字母序列中, a 出现的次数总是大于等于 b 出现的次数, b 出现的次数总是大于等于 c 出现的次数等等. 按这种方式所得到的杨图就给出外积$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$中可能出现的 $IR[\nu]$. 如果同一杨图$[\nu]$可按不同的方式出现$\{\nu_1\nu_2\nu\}$次, 则表明这个 $IR[\nu]$ 在$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$外积约化时出现$\{\nu_1\nu_2\nu\}$次.

例 1 $\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\\hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|}\hline a \\\hline\end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & a \\\hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\\hline a \\\cline{1-1}\end{array}$

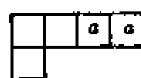
所以$[2]\otimes[1]=[3]+[21]$

例 2 $\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\\hline\end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\\hline\end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \ & \ & a & a \\\hline\end{array} + \begin{array}{|c|c|c|}\hline \ & \ & a \\\hline a \\\cline{1-1}\end{array} + \begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\\hline a & a \\\hline\end{array}$

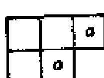
因此$[2]\otimes[2]=[4]+[31]+[22]$. 注意$[2]\otimes[2]\neq([2]\otimes[1])\otimes[1]$.

例 3 求$[21]\otimes[21]$的外积约化.

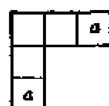
用$\begin{array}{|c|c|}\hline \ & \ \\\hline \ \\\cline{1-1}\end{array}$代表第一个杨图, 用$\begin{array}{|c|c|}\hline a & a \\\hline b \\\cline{1-1}\end{array}$代表第二个杨图. 先用两个 a 来扩大第一个杨图, 按以上规则拼出的杨图有下列四种



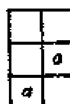
(i)



(ii)

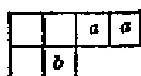


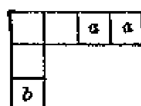
(iii)



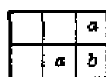
(iv)

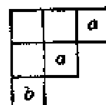
然后再把 b 拼上去. 从(i)得到下列两种:



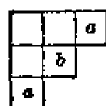


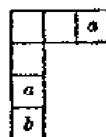
注意 $\begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline \ & \ & a & a & b \\\hline \ \\\cline{1-1}\end{array}$这种杨图是不允许的, 因为从这个杨图读出的字母顺序是 baa, a 还未出现时已出现了 b. 从(ii)也得到两种:





注意 这儿第一个杨图是允许的, 因为读出字母的顺序是 aba, 满足 a 出现的次数总是大于等于 b 出现的次数的要求. 同样从(iii)可得:





注意 (杨盘图: 第一行 □□a, 第二行 □a, 第三行 b) 和 (杨盘图: 第一行 □□a, 第二行 □b, 第三行 a) 同属[321]，但构造方式不同，所以[321]出现两次，最后得

$$[21]\otimes[21]=[42]+[411]+[33]+2[321]+[31^3]+[2^3]+[2^21^2].\tag{4-137}$$

Itzykson 等已用此方法计算出了 $n\leqslant 8$ 时的 $\{\nu_1\nu_2\nu\}$ 值. 由(4-136)式两边维数相等，可得

$$h_{\nu_1}h_{\nu_2}h_3=\sum_{\nu}\{\nu_1\nu_2\nu\}h_{\nu}.\tag{4-138}$$

上式可用来检查应用 Littlewood 规则时有无错误.

后面将证明，将(4-136)式中等式两边的杨图都进行转置仍成立. 即

$$[\tilde{\nu}_1]\otimes[\tilde{\nu}_2]=\sum_{\nu}\{\nu_1\nu_2\nu\}[\tilde{\nu}].\tag{4-139}$$

表 4·14-2 给出了 S_3–S_5 群的外积约化规则.

表 4·14-2 S_3–S_5 群的外积约化规则

S_3 群①

	[3]	[21]	
↑ [2]⊗[1]	1	1	[11]⊗[1] ↓
	[1³]	[21]	

① 上表头和左表头相配合
下表头和右表头相配合

S_4 群

	[4]	[31]	[22]	[211]	[1⁴]	
↑ [3]⊗[1]	1	1				[1³]⊗[1] ↓
[21]⊗[1]		1	1	1		
[2]⊗[2]	1	1	1			[1²]⊗[1²]
[2]⊗[11]		1		1		
	[1⁴]	[211]	[22]	[31]	[4]	

S_5 群

	[5]	[41]	[32]	[311]	[221]	[21³]	[1⁵]	
↑ [4]⊗[1]	1	1						[1⁴]⊗[1] ↓
[31]⊗[1]		1	1	1				[211]⊗[1]
[22]⊗[1]			1		1			
[3]⊗[2]	1	1	1					[1³]⊗[11]
[21]⊗[2]		1	1	1	1			[21]⊗[11]
[3]⊗[11]		1		1				[1³]⊗[2]
	[1⁵]	[21³]	[221]	[311]	[32]	[41]	[5]	

习　　题

用 Littlewood 规则检验上表中 S_5 的外积约化规则.

§ 4.15　外积约化系数(ORC)的计算

将(4-129)式中 N 个基组合成 S_n 群的 IR 基

$$\Psi_m^{[\nu]\tau}=\sum_{m_1m_2\omega}C_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}^{\nu_\tau m}\,|m_1m_2\omega\rangle\tag{4-140}$$

的组合系数

$$C_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}^{\nu_\tau m}\equiv C_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}^{\nu_\tau m}\tag{4-141}$$

称为外积约化系数. 若用广义杨盘[(4-129)式]表示，则(4-140)式可写成

$$|Y_m^{[\nu]\tau}(\omega^0)\rangle = \sum_{m_1\omega_1 m_2\omega_2} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1\omega_1,\nu_2 m_2\omega_2}|Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1)\rangle|Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2)\rangle. \tag{4-142a}$$

上式中(ω^0)可以省去．由上式得到

$$C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1\omega_1,\nu_2 m_2\omega_2} = \langle Y_m^{[\nu]\tau}|Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1)Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2)\rangle. \tag{4-142b}$$

由(4-28)式，(4-135)式和(4-140)式可得到ORC所满足的联立本征方程：

$$\sum_{m_1'm_2'\omega'}[\langle m_1m_2\omega|C(f)|m_1'm_2'\omega'\rangle - \lambda_f\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\delta_{\omega\omega'}]C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2',\omega'}=0, \tag{4-143}$$

$$f=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2,\quad \tau=1,\ 2,\ \cdots,\ \{\nu_1\nu_2\nu\}.$$

当方程(4-143)式对应于本征值$(\nu,\ m)=(\lambda_n,\ \lambda_{n-1},\ \cdots,\ \lambda_2)$只有一个解时，则$\{\nu_1\nu_2\nu\}=1$，这时附加指标$\tau$是多余的，可以省略；如果对于本征值$(\nu,\ m)$，方程(4-143)式有$k$组解，则表明$\{\nu_1\nu_2\nu\}=k$．所以本征方程(4-143)式事实上既给出外积约化规则，又给出ORC．

现在来研究$\boldsymbol{C}(f)$矩阵元的算法．利用

$$R(\omega')=(\tilde{\omega})=\pi_1\pi_2(\omega) \tag{4-144}$$

得

$$R|m_1'm_2'\omega'\rangle=|m_1'm_2'\tilde{\omega}\rangle=\pi_1\pi_2|m_1'm_2'\omega\rangle=\sum_{m_1m_2}D^{(\nu_1)}_{m_1m_1'}(\pi_1)D^{(\nu_2)}_{m_2m_2'}(\pi_2)|m_1m_2\omega\rangle, \tag{4-145}$$

$$\pi_1\pi_2=\begin{pmatrix}\omega\\ \tilde{\omega}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\omega\\ R\omega'\end{pmatrix},\quad \pi_i\in S_{n_i}(\omega_i),$$

$$\pi_1=\begin{pmatrix}a_1 & a_2\cdots a_{n_1}\\ \tilde{a}_1 & \tilde{a}_2\cdots\tilde{a}_{n_1}\end{pmatrix}=(a_{i_1}a_{i_2}\cdots a_{i_f}),\quad \pi_2=\begin{pmatrix}a_{n_1+1}\cdots a_n\\ \tilde{a}_{n_1+1}\cdots\tilde{a}_n\end{pmatrix}=(a_{j_1}a_{j_2}\cdots a_{j_{f'}}), \tag{4-146a}$$

(4-146a)式右方为轮换形式．定义和π_i相对应的两个算符p_i：

$$p_1=(i_1i_2\cdots i_f)\in S_{n_1}(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1),\quad p_2=(j_1-n_1,\ j_2-n_1,\ \cdots,\ j_{f'}-n_1)\in S_{n_2}(1,2,\cdots,n_2). \tag{4-146b}$$

根据前面广义杨盘的定义，显然可知$S_{n_i}(\omega_i)$群中置换算符π_i的IR矩阵和$S_{n_i}(1,\ 2,\ \cdots,\ n_i)$群中$p_i$的$IR$矩阵相等

$$D^{(\nu_i)}(\pi_i)=D^{[\nu_i]}(p_i).$$

由(4-145)式及(4-135)式的正交性，就可得到R在非耦合表象中的矩阵元

$$\langle m_1m_2\omega|R|m_1'm_2'\omega'\rangle=D^{(\nu_1)}_{m_1m_1'}(\pi_1)D^{(\nu_2)}_{m_2m_2'}(\pi_2). \tag{4-147}$$

例　$n_1=n_2=3$，$(\omega')=(134,\ 256)$，$R=p_{36}$．(4-144)式现在可写成

$$p_{36}(134,\ 256)=(\tilde{\omega})=(164,253)=\pi_1\pi_2(\omega)=p_{46}p_{35}(146,\ 235),$$

$$(\omega)=(a_1\cdots a_6)=(146,\ 235),$$

$$\pi_1=\begin{pmatrix}146\\164\end{pmatrix}=p_{46}=(a_2a_3),\qquad \pi_2=\begin{pmatrix}235\\253\end{pmatrix}=p_{35}=(a_5a_6),$$

$$p_1=p_{23},\qquad p_2=(5-3,\ 6-3)=p_{23},$$

$$p_{36}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\ \hline 4\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&6\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle\right)=p_{46}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\ \hline 6\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle p_{35}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&5\\ \hline 3\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$$

$$=\sum_{mm'}D^{[21]}_{m1}(23)|Y^{[21]}_m(146)\rangle D^{[21]}_{m'2}(23)|Y^{[21]}_{m'}(235)\rangle$$

$$=\frac{1}{4}\left(-\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\ \hline 6\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle+\sqrt{3}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&6\\ \hline 4\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle\right)\left(\sqrt{3}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle+\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&5\\ \hline 3\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle\right),$$

式中利用了$S_3(146)$群对换p_{46}的IR矩阵和$S_3(123)$群中p_{23}的IR矩阵相等(后者可由表

4·4-2查得)，对 p_{35} 有类似的对等关系. 即

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 6\\\cline{1-1}\end{array} \middle| p_{46} \middle| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&6\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array} \right\rangle = \left\langle \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array} \middle| p_{23} \middle| \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array} \right\rangle$$

等.

知道了 R 的矩阵元后，可同样利用递推关系(4-94)式求 $C(f)$ 的矩阵元. 和(4-96)式相类似，现在 $\boldsymbol{C}(f)$ 仍为实对称矩阵，即

$$\langle m_1m_2\omega|C(f)|m_1'm_2'\omega'\rangle=\langle m_1'm_2'\omega'|C(f)|m_1m_2\omega\rangle.$$

求得了 $\boldsymbol{C}(f)$ 的矩阵元，就可由(4-143)式解出 ORC.

位相约定：ORC 的相对位相自然仍取 Yamanouchi 标准位相. 而绝对位相则规定 $m=m_1=m_2=1$ 而正序列编号 ω 为尽可能小的那个非零 ORC 为正值

$$O^{[\nu]1}_{[\nu_1]1,[\nu_2]1,\omega}\Big|_{\omega=\min}>0. \tag{4-148}$$

例 1 求 S_3 群[2]⊗[1]的 ORC.

$S_2(12)$ 和 $S_1(3)$ 的 IR 基的积记为

$$\varphi_1=\left|\ \boxed{1}\boxed{2}\ \ \boxed{3}\ \right\rangle.$$

正序列有三个：$(\omega)=(12,3),(13,2),(23,1)$，所以 $h_3=3$，相应的保序置换算符为 $Q_\omega=e,(23),(123)$. 在 Q_ω 作用下共有 $N=h_{\nu_1}h_{\nu_2}h_3=1\times1\times3=3$ 个正交归一基

$$|1\rangle=\left|\ \boxed{1}\boxed{2}\ \ \boxed{3}\ \right\rangle,\quad |2\rangle=\left|\ \boxed{1}\boxed{3}\ \ \boxed{2}\ \right\rangle,\quad |3\rangle=\left|\ \boxed{2}\boxed{3}\ \ \boxed{1}\ \right\rangle$$

它们荷载 $S_3(123)$ 群的一个三维可约表示. 在这个简单情况下，可以很方便地算出对换算符的矩阵元. 事实上由下表

表 4·15-1

φ_i \ $p\varphi_i$ \ p	(12)	(13)	(23)
1	1	3	2
2	3	2	1
3	2	1	3

就可得 $C(2)=(12)$ 和 $C(3)=(12)+(23)+(13)$ 的矩阵表示. 解出 $C(2)$ 和 $C(3)$ 的共同本征方程就可得表 4·17-2 中的 ORC.

例 2 求 S_4 群[21]⊗[1]的 ORC.

$S_3(123)$ 群[21]表示的两个基和 $S_1(4)$ 群的一个基相乘得到两个乘积基

$$\left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\ \ \boxed{4}\ \right\rangle \text{ 和 } \left|\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\ \ \boxed{4}\ \right\rangle. \tag{4-149a}$$

正序列(ω)有四个. (ω)及其编号 ω、宇称 δ_ω 列在表 4·15-2

两个乘积基(4-149a)在$\begin{pmatrix}n\\n_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}4\\3\end{pmatrix}=4$ 个保序置换作用下可以得到 8 个正交归一基 φ_i. φ_i 的编号及标志 $m_1m_2\omega$ 和 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1)Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2)$ 的对照表列在表 4·15-3.

表 4·15-2

$\omega(\delta_\omega)$	1(+)	2(−)	3(+)	4(−)
(ω)	(123, 4)	(124, 3)	(134, 2)	(234, 1)

表 4·15-3 $m_1m_2\omega$ 和 $Y^{\nu_1}_{m_1}(\omega_1)Y^{\nu_2}_{m_2}(\omega_2)$的转换, $[\nu_1]=[21]$, $[\nu_2]=1$

φ_i	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	φ_5	φ_6	φ_7	φ_8
$m_1m_2\omega$	111	112	113	114	211	212	213	214
$Y^{[21]}_{m_1}(\omega_1)Y^{[1]}(\omega_2)$	[1 2 / 3] [4]	[1 2 / 4] [3]	[1 3 / 4] [2]	[2 3 / 4] [1]	[1 3 / 2] [4]	[1 4 / 2] [3]	[1 4 / 3] [2]	[2 4 / 3] [1]

由上表立刻可求得 $C(2)$ 的本征函数

$$\lambda_2=1: \ \psi_1=\varphi_1, \ \psi_2=\varphi_2, \ \psi_3=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_3+\varphi_4), \ \psi_4=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_7+\varphi_8),$$

$$\lambda_2=-1: \ \phi_1=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_3-\varphi_4), \ \phi_2=\varphi_5, \ \phi_3=\varphi_6, \ \phi_4=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_7-\varphi_8). \tag{4-149b}$$

由(4-145)式和(4-149b)可以求出 $C(f)$ 在 $\psi_1\cdots\psi_4$ 上的矩阵, 记为 $\boldsymbol{C}^{(+)}(f)$

$$\boldsymbol{C}^{(+)}(4)=\begin{pmatrix} 0 & 1 & -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{\frac{1}{2}} & \sqrt{2} & 1 & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{C}^{(+)}(3)=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{4-149c}$$

将它们同时对角化, 即可求出 $\lambda_2=+1$ 的 ORC. 类似地可求出 $\lambda_2=-1$ 的 ORC, 列在表 4·17-3d.

机器计算置换群 ORC

计算 ORC 的本征函数法很容易程序化. 其步骤同§4·11, 只需将(4-112b)式中的 $\boldsymbol{U}^\tau$ 理解为 ORC. 而(4-114)式用以下式子代替

$$C^{\nu\tau m'}_{\nu_1 a,\nu_2 b,\omega}=\frac{1}{D^{(\nu)}_{m'm}(T)}\sum_{cd\omega'}[D^{(\nu_1)}_{ac}(\pi_1)D^{(\nu_2)}_{bd}(\pi_2)-D^{(\nu)}_{mm}(T)\delta_{ac}\delta_{bd}\delta_{\omega\omega'}]C^{\nu\tau m}_{\nu_1 c,\nu_2 d,\omega'}. \tag{4-150}$$

我们已编好计算 ORC 的程序, 计算了 S_3–S_6 的 ORC 表[19]. S_3–S_5 的 ORC 列在表 4·17.

§4.16 外积约化系数的性质

(1) 幺正性

$$\sum_{m_1m_2\omega} C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}C^{\nu'\tau' m'}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{mm'},$$

$$\sum_{\nu\tau m} C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}C^{\nu\tau m}_{\nu_1m_1',\nu_2m_2',\omega'}=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'}\delta_{\omega\omega'}. \tag{4-151}$$

由(4-151)式可得到(4-140)式的逆展开

$$|m_1 m_2 \omega\rangle = \sum_{\nu \tau m} C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega} \Psi^{[\nu_\tau]}_{m}. \tag{4-152}$$

事实上 ORC 就是将$(n-1)$个二循环类算符从非对角(非耦合)表象(4-129)式变成对角(耦合)表象(4-140)式的幺正变换矩阵.

(2) 因为外积和因子次序无关,所以当 $\nu_1 \neq \nu_2$ 时有

$$C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m \omega_1, \nu_2 m_2 \omega_2} = \epsilon_1 C^{\nu_\tau m}_{\nu_2 m_2 \omega_2, \nu_1 m_1 \omega_1}, \tag{4-153a}$$

式中位相因子 ϵ_1 决定于绝对位相约定(4-148). 显见.

$$\epsilon_1 = \mathrm{sign}\left(C^{[\nu]_1 1}_{[\nu_1]1, [\nu_2]1, \omega}\Big|_{\omega=\max}\right). \tag{4-153b}$$

这里 $\omega=\max$ 代表取 ω 编号尽可能大的非零 ORC. 对 S_2-S_5 群,ϵ_1 的数值表见总附录中表 A-2,对S_2-S_6 群的,见文献[12]p. 49 表 12.

当 $\nu_1=\nu_2$ 时,如果 ν 只出现一次,则 ORC 自动满足

$$C^{\nu m}_{\nu_1 m_1 \omega_1, \nu_2 m_2 \omega_2} = \delta_\nu C^{\nu m}_{\nu_1 m_2 \omega_2, \nu_1 m_1 \omega_1}, \tag{4-154a}$$

式中 $\delta_\nu = +1$ 或 -1. 和 CG 系数情形类似,我们也称 $\delta_\nu = +1(-1)$表示属子"对称"("反对称")乘积. 如果 ν 出现不止一次,则经过适当组合,总可使 ORC 满足

(3)
$$C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_1 \omega_1, \nu_1 m_2 \omega_2} = \delta_{\nu_\tau} C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_2 \omega_2, \nu_1 m_1 \omega_1}, \quad \delta_{\nu_\tau} = \pm 1. \tag{4-154b}$$

下面我们来导出置换群 ORC 的另一个重要性质. 由(4-147)式和(4-67)式可得

$$\langle \tilde{m}_1 \tilde{m}_2 \omega | R_a | \tilde{m}'_1 \tilde{m}'_2 \omega' \rangle = \delta_{\pi_1} \delta_{\pi_2} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \Lambda^{\nu_1}_{m'_1} \Lambda^{\nu_2}_{m'_2} \langle m_1 m_2 \omega | R_a | m'_1 m'_2 \omega' \rangle, \tag{4-155}$$

式中 δ_{π_1}, δ_{π_2} 是置换算符 $\pi_1 \pi_2$ 的置换宇称,它由(4-144)式决定. 令(4-144)式中 $R=R_a$,并由该式两边置换宇称相等得

$$\delta_a \delta_{\omega'} = \delta_{\pi_1} \delta_{\pi_2} \delta \omega,$$

$$\therefore \quad \delta_{\pi_1} \delta_{\pi_2} = \delta_a \delta_\omega \delta_{\omega'}.$$

将上式代入(4-155)得

$$\langle \tilde{m}_1 \tilde{m}_2 \omega | R_a | \tilde{m}'_1 \tilde{m}'_2 \omega' \rangle = \delta_a \delta_\omega \delta_{\omega'} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \Lambda^{\nu_1}_{m'_1} \Lambda^{\nu_2}_{m'_2} \langle m_1 m_2 \omega | R_a | m'_1 m'_2 \omega' \rangle. \tag{4-156a}$$

由(4-143)式得

$$\sum_{m'_1 m'_2 \omega'} \langle \tilde{m}_1 \tilde{m}_2 \omega | C(f) | \tilde{m}'_1 \tilde{m}'_2 \omega' \rangle C^{\tilde{\nu}_\tau \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}'_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}'_2, \omega'} = \lambda_f C^{\tilde{\nu}_\tau, \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega}. \tag{4-156b}$$

将(4-156a)式代入上式即得

$$\sum_{m'_1 m'_2 \omega'} \langle m_1 m_2 \omega | C(f) | m'_1 m'_2 \omega' \rangle \delta_a \delta_\omega \delta_{\omega'} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \Lambda^{\nu_1}_{m'_1} \Lambda^{\nu_2}_{m'_2} C^{\tilde{\nu}_\tau \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}'_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}'_2 \omega'} = C^{\tilde{\nu}_\tau, \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega}.$$

由于 $C(f)$ 为二循环类算符, 其中每一个置换 R_a 的宇称 δ_a 都为 -1, 所以上式中 δ_a 可作为公因子提出. 将 $\delta_a = -1$ 代入上式即得

$$\sum_{m'_1 m'_2 \omega'} \langle m_1 m_2 \omega | C(f) | m'_1 m'_2 \omega' \rangle \delta_{\omega'} \Lambda^{\nu_1}_{m'_1} \Lambda^{\nu_2}_{m'_2} C^{\tilde{\nu}_\tau \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}'_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}'_2, \omega'} = \tilde{\lambda}_f \delta_\omega \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} C^{\tilde{\nu}_\tau \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega}. \tag{4-157}$$

式中利用了 $\tilde{\lambda}_f = -\lambda_f$[(4-26a)]式. 由此可知

$$C^{(\tilde{\nu}), \tau \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega} = \eta^{\nu_\tau}_{m} \delta_\omega \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \sum_{\tau'} a_{\tau\tau'} C^{\nu_{\tau'} m}_{\nu_1 m_1 \nu_2 m_2, \omega}. \tag{4-158}$$

式中 $a_{\tau\tau'}$ 为组合系数, $\eta^{\nu_\tau}_{m}$ 为只和 ν, τ, m 有关的相因子. 如果 ν_1, ν_2, ν 不同时为自轭表示,我们总可适当选择本征方程的解,使得下式成立

$$C^{(\tilde{\nu})\tau, \tilde{m}}_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega} = \eta^{\nu_\tau}_{m} \delta_\omega \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}. \tag{4-159}$$

如果 ν 只出现一次,则上式自动满足.

相因子 $\eta^{\nu_\tau}_{m}$ 可这样来定: 由(4-67)式得

$$\langle \Psi^{[\tilde{\nu}_\tau]}_{\tilde{m}} | R_a | \Psi^{[\tilde{\nu}_\tau]}_{\tilde{m}'} \rangle = \delta_a \Lambda^{\nu}_{m} \Lambda^{\nu}_{m'} \langle \Psi^{[\nu_\tau]}_{m} | R_a | \Psi^{[\nu_\tau]}_{m'} \rangle. \tag{4-160}$$

利用(4-156a)式和(4-159)式得:

$$
\begin{aligned}
\langle \Psi_{\tilde{m}}^{[\tilde{\nu}\tau]} | R_a | \Psi_{\tilde{m}'}^{[\tilde{\nu}\tau]} \rangle &= \sum \eta_m^{\nu\tau} \delta_\omega \Lambda_{m_1}^{\nu_1} \Lambda_{m_2}^{\nu_2} \eta_{m'}^{\nu\tau} \Lambda_{m_1'}^{\nu_1} \Lambda_{m_2'}^{\nu_2} \delta_{\omega'} C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}^{[\nu]\tau, m} C_{\nu_1 m_1', \nu_2 m_2', \omega'}^{[\nu]\tau, m'} \langle \tilde{m}_1 \tilde{m}_2 \omega | R_a | \tilde{m}_1' \tilde{m}_2' \omega' \rangle \\
&= \eta_m^{\nu\tau} \eta_{m'}^{\nu\tau} \delta_a \sum C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}^{[\nu]\tau, m} C_{\nu_1 m_1', \nu_2 m_2' \omega'}^{[\nu]\tau, m'} \langle m_1 m_2 \omega | R_a | m_1' m_2' \omega' \rangle \\
&= \eta_m^{\nu\tau} \eta_{m'}^{\nu\tau} \delta_a \langle \Psi_m^{[\nu]\tau} | R_a | \Psi_{m'}^{[\nu]\tau} \rangle. \qquad (4\text{-}161)
\end{aligned}
$$

比较(4-160)式和(4-161)式可知

$$\eta_m^{\nu\tau} = \epsilon_2 \Lambda_m^\nu,$$

ϵ_2 为位相因子. 将上式代入(4-159)式,就得到 ORC 的一个重要对称性:

(4) $$C_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1 \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega}^{\tilde{\nu}\tau \tilde{m}} = \epsilon_2 \delta_\omega \Lambda_m^\nu \Lambda_{m_1}^{\nu_1} \Lambda_{m_2}^{\nu_2} C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}^{\nu\tau, m} \quad \text{当 } \nu_1, \nu_2, \nu \text{ 不全为自厄.} \qquad (4\text{-}162a)$$

位相因子 ϵ_2 决定于绝对位相约定. 显见

$$\epsilon_2 = \Lambda_{h_{\nu_1}}^{\nu_1} \Lambda_{h_{\nu_2}}^{\nu_2} \Lambda_m^\nu \operatorname{sign}\left(\delta_\omega C_{[\nu_1]h_{\nu_1}, [\nu_2]h_{\nu_2}, \omega}^{[\nu]\tau, h_\nu} \big|_{\omega=\min}\right). \qquad (4\text{-}162b)$$

如果 ν_1, ν_2, ν 同时都为自厄表示,则一般说(4-162a)式不成立,而应代以下式

$$C_{\nu_1 \tilde{m}_1, \nu_2 \tilde{m}_2, \omega}^{\nu\tau \tilde{m}} = \delta_\omega \Lambda_m^\nu \Lambda_{m_1}^{\nu_1} \Lambda_{m_2}^{\nu_2} \sum_{\tau'} a_{\tau\tau'} C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}^{\nu\tau' m}. \qquad (4\text{-}162c)$$

(4-162a)表明, 如果已知 $[\nu_1] \otimes [\nu_2] = \sum_\nu \{\nu_1 \nu_2 \nu\} [\nu]$, 则立即有 (4-139) 式, 亦即 $[\tilde{\nu}_1] \otimes [\tilde{\nu}_2] = \sum_\nu \{\nu_1 \nu_2 \nu\} [\tilde{\nu}]$.

若已知道了 ORC $C_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}^{\nu\tau m}$, 则由(4-163)式可立即得到共轭表示的 ORC $C_{\tilde{\nu}_1 \tilde{m}_1, \tilde{\nu}_2 \tilde{m}_2, \omega}^{\tilde{\nu}\tau \tilde{m}}$.

(5) 特例

当$[\nu]$为全对称表示时(这时$[\nu_1]$和$[\nu_2]$必为全对称表示, 即$[\nu_1]=[n_1]$, $[\nu_2]=[n_2]$), ORC 很简单

$$C_{[n_1]1, [n_2]1, \omega}^{[n], 1} = \begin{pmatrix} n \\ n_1 \end{pmatrix}^{-1/2}. \qquad (4\text{-}163a)$$

根据对称性(4-162a)式,由上式又可得到$[\nu]$为全反对称表示时的 ORC、

$$C_{[1^{n_1}]1, [1^{n_2}], \omega}^{[1^n], 1} = \delta_\omega \begin{pmatrix} n \\ n_1 \end{pmatrix}^{-1/2}. \qquad (4\text{-}163b)$$

§4.17 S_2-S_5 群的 ORC 表及$[\nu_1]$、$[\nu_2]$ 为对称表示的 S_6 群的 ORC 表

对外积约化系数表作如下说明:

1. 表 4·17-1 至 4·17-3, 是用两个广义杨盘 $Y_{m_1}^{\nu_1}(\omega_1) Y_{m_2}^{\nu_2}(\omega_2)$ 作表头的, 表 4·17-4 至 4·17-8 是用 $m_1 m_2 \omega$ 作表头的,二者可互相转换,转换的例子见表 4·15-3.

2. 表的第二列 N 为归一系, 表中给出的数值为 ORC 的平方值, 带 * 号者表示该系数为负值,空白处表示该系数为零. 例如由表 4·17-5a 和 5d 及(4-142b)式得

$$C_{[21]2, [2]1, \omega=10}^{[41]3} = \left\langle \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 & 5 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1} \end{array} \;\middle|\; \begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 5 \\ \hline 4 \\ \cline{1-1} \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline \end{array} \right\rangle = -\sqrt{\frac{12}{180}}.$$

3. 表 4·17-3a, 3b, 4b, 5b, 5c 中,将$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$和$[\tilde{\nu}_1]\otimes[\tilde{\nu}_2]$的 ORC 表分别列在同一表的上、下方.

4. 每个表既可纵读也可横读.

5. 利用对称性(4-153)、(4-163)式,可得到另外一些外积约化系数. Λ_m^ν 表见表 4·4-1.

6. 前面假定(4-134)式中 W_1 盘和 W_2 盘中态指标全不相同. 如果 W_1 盘和 W_2 盘中

态指标有相同，则可证明用 ORC 构成的基

$$\Psi_m^{[\nu]\tau}=\sum_{m_1m_2\omega} C_{\nu_1m_1\omega_1,\,\nu_2m_2\omega_2}^{[\nu]\tau m}\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1,\ W_1)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2,\ W_2). \qquad (4\text{-}164a)$$

如果它不为零，则仍然是 S_n 群标准基$[\nu]m$，但一般说不再归一，而且也不再是 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基．这可以用投影算符来证明：

$$\Psi_m^{[\nu]\tau}=\text{const}P_m^{[\nu]\overline{m}}[\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1,\ W_1)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2,\ W_2)]$$
$$=\sum_{m_1m_2\omega} C_{\nu_1m_1\omega_1,\,\nu_2m_2\omega_2}^{[\nu]\tau,\,m}\psi_{m_1}^{[\nu_1]}(\omega_1,\ W_1)\psi_{m_2}^{[\nu_2]}(\omega_2,\ W_2). \qquad (4\text{-}164b)$$

因为投影算符 $P_m^{[\nu]\overline{m}}$ 只置换粒子坐标，和上式两边 W_1, W_2 盘中态指标是否相同无关．

例如若有两个氘核空间波函数 $\psi(12)$和 $\psi(34)$，$[\nu_1]=[\nu_2]=[2]$．由(4-164a)式及表4·17-3b 并经重新归一化后得到 S_4 群的标准基：

$$\begin{aligned}
&\Psi^{[4]}=\sqrt{\frac{1}{3}}[\psi(12)\psi(34)+\psi(13)\psi(24)+\psi(14)\psi(23)],\\
&\Psi_1^{[22]}=\sqrt{\frac{1}{6}}[2\psi(12)\psi(34)-\psi(13)\psi(24)-\psi(14)\psi(23)],\\
&\Psi_2^{[22]}=\sqrt{\frac{1}{2}}[\psi(13)\psi(24)-\psi(14)\psi(23)],\\
&\Psi_m^{[31]}\equiv 0.
\end{aligned} \qquad (4\text{-}164c)$$

ORC 的用途见§4·18, §7·12, §7·17, §9·2 及文献[12]．

表 4.17　置换群外积约化系数表

S_2　1　$[1]\otimes[1]=[2]\oplus[11]$

		1,2	2,1
[2]	2	1	1
[11]	2	1	*1

表头意义

$Y_{m_1}^{\nu_1}(\omega_1)\,Y_{m_2}^{\nu_2}(\omega_2)$
$[\nu]m$ ＼ N

S_3　2　$[2]\otimes[1]=[3]\oplus[21]$

		12,3;	13,2;	23,1
[3]	3	1	1	1
[21]1	6	4	*1	*1
2	2		1	*1
[21]1	2		1	1
2	6	4	1	*1
[1³]	3	1	*1	1
		1 / 2, 3	1 / 3, 2	2 / 3, 1

$[11]\otimes[1]=[21]\oplus[1^3]$

S_4　3a　$[3]\otimes[1]=[4]\oplus[31]$

		123,4;	124,3;	134,2;	234,1
[4]	4	1	1	1	1
[31]1	12	9	*1	*1	*1
2	6		4	*1	*1
3	2			1	*1
[211]1	2			1	1
2	6		4	1	*1
3	12	9	1	*1	1
[1⁴]	4	1	*1	1	*1
		1 / 2,4 / 3	1 / 2,3 / 4	1 / 3,2 / 4	2 / 3,1 / 4

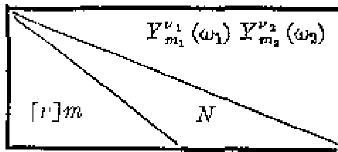
$[1^3]\otimes[1]=[211]\oplus[1^4]$

S_4　3b　$[2]\otimes[2]=[4]\oplus[31]\oplus[22]$

		12,34;	34,12;	23,14;	14,23;	13,24;	24,13
[4]	6	1	1	1	1	1	1
[31]1	6	1	*1	1	*1	1	*1
2	12	4	*4	*1	1	*1	1
3	4			*1	1	1	*1
[22]1	12	4	4	*1	*1	*1	*1
2	4			*1	*1	1	1
[22]1	4			1	1	1	1
2	12	4	4	*1	*1	1	1
[211]1	4			1	*1	1	*1
2	12	4	*4	*1	1	1	*1
3	6	*1	1	*1	1	1	*1
[1⁴]	6	1	1	1	1	*1	*1
		1 3 / 2,4	3 1 / 4,2	2 1 / 3,4	1 2 / 4,3	1 2 / 3,4	2 1 / 4,3

$[11]\otimes[11]=[22]+[211]+[1^4]$

表头意义



S_4　3c　$[2]\otimes[11]=[31]\oplus[211]$

		$12,\frac{3}{4};$	$34,\frac{1}{2};$	$23,\frac{1}{4};$	$14,\frac{2}{3};$	$13,\frac{2}{4};$	$24,\frac{1}{3}$
[31]1	3	1		1		1	
2	24	*4		1	9	1	9
3	8		4	1	*1	*1	1
[211]1	8	4		*1	1	*1	1
2	24		4	*9	*1	9	1
3	3		1		1		*1

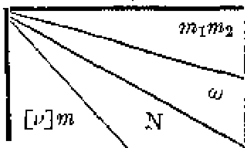
S_4　3d　$[21]\otimes[1]=[31]\oplus[22]\oplus[211]$

		$\substack{12\\3},4;$	$\substack{12\\4},3;$	$\substack{13\\4},2;$	$\substack{23\\4},1$	$\substack{13\\2},4;$	$\substack{14\\2},3;$	$\substack{14\\3},2;$	$\substack{24\\3},1$
[31]1	3		1	1	1				
2	96	36	4	*1	*1			27	27
3	32			1	*1	12	12	3	*3
[22]1	16	4	4	*1	*1			*3	*3
2	16			3	*3	4	*4	*1	1
[211]1	32	12	*12	3	3			*1	*1
2	96			*27	27	36	*4	*1	1
3	3						1	*1	1

S_5　4a　$f_1=4,\ f_2=1$

$\omega(\delta\omega)$	1(+)	2(−)	3(+)	4(−)	5(+)
$(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	(1234, 5)	(1235, 4)	(1245, 3)	(1345, 2)	(2345, 1)

表头意义



S_5　4b　$[4]\otimes[1]=[5]\oplus[41]$

		1,1				
		1	2	3	4	5
[5]	5	1	1	1	1	1
[41]1	20	16	*1	*1	*1	*1
2	12		9	*1	*1	*1
3	6			4	*1	*1
4	2				1	*1
$[21^3]$1	2				1	1
2	6			4	1	*1
3	12		9	1	*1	1
4	20	16	1	*1	1	*1
$[1^5]$	5	1	*1	1	*1	1

$[1^4]\otimes[1]=[21^3]\oplus[1^5]$

续表

S_5 4c [31]⊗[1]=[41]⊕[32]⊕[311]

		1,1					2,1					3,1				
		1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
[41]1	4		1	1	1	1										
2	540	144	9	*1	*1	*1			128	128	128					
3	270			4	*1	*1	72	72	8	*2	*2				54	54
4	90				1	*1				2	*2	24	24	24	6	*6
[32]1	27	9	9	*1	*1	*1			*2	*2	*2					
2	432			128	*32	*32	144	*36	*4	1	1				*27	*27
3	144				32	*32				*1	1	48	*12	*12	*3	3
4	16							4	4	*1	*1				*3	*3
5	16									3	*3		4	*4	*1	1
[311]1	45	18	*18	2	2	2			*1	*1	*1					
2	1440			*512	128	128	576	*36	*4	1	1				*27	*27
3	480				*128	128				*1	1	192	*12	*12	*3	3
4	32							12	*12	3	3				*1	*1
5	96									*27	27		36	*4	*1	1
6	3													1	*1	1

S_5 4d [211]⊗[1]=[311]⊕[221]⊕[21^3]

		1,1					2,1					3,1				
		1	2	3	4	5	1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
[311]1	3			1	1	1										
2	96		36	4	*1	*1				27	27					
3	32				1	*1		12	12	3	*3					
4	480	192	12	*12	3	3				*1	*1				128	128
5	1440				*27	27	576	36	*4	*1	1			512	128	*128
6	45								1	*1	1	18	18	2	*2	2
[221]1	16		4	4	*1	*1				*3	*3					
2	16				3	*3		4	*4	*1	1					
3	144	48	12	*12	3	3				*1	*1				*32	*32
4	432				*27	27	144	36	*4	*1	1			*128	*32	32
5	27								2	*2	2	9	*9	*1	1	*1
[21^3]1	90	24	*24	24	*6	*6				2	2				*1	*1
2	270				54	*54	72	*72	8	2	*2			*4	*1	1
3	540								*128	128	*128	144	*9	*1	1	1
4	4												1	*1	1	*1

S_5 4e [22]⊗[1]=[32]⊕[221]

		3,1					2,1				
		1	2	3	4	5	1	2	3	4	5
[32]1	3			1	1	1					
2	96		36	4	*1	*1				27	27
3	32				1	*1		12	12	3	*3
4	32	16	4	4	*1	*1				*3	*3
5	32				3	*3	16	4	*4	*1	1
[221]1	32	16	*4	*4	1	1				3	3
2	32				*3	3	16	*4	4	1	*1
3	32		12	*12	3	3				*1	*1
4	96				*27	27		36	*4	*1	1
5	3								1	*1	1

S_5 5a $f_1=3,\ f_2=2$

ω $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	1(+) (123, 45)	2(−) (124, 35)	3(+) (134, 25)	4(−) (234, 15)	5(+) (125, 34)
ω $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	6(−) (135, 24)	7(+) (235, 14)	8(+) (145, 23)	9(−) (245, 13)	10(+) (345, 12)

S_5 5b [3]⊗[2]=[5]⊕[41]⊕[32]

		1,1									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[5]	10	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
[41]1	60	9	9	9	9	*4	*4	*4	*4	*4	*4
2	36	9	*1	*1	*1	4	4	4	*4	*4	*4
3	18		4	*1	*1	4	*1	*1	1	1	*4
4	6			1	*1		1	*1	1	*1	
[32]1	18	9	*1	*1	*1	*1	*1	*1	1	1	1
2	36		16	*4	*4	*4	1	1	*1	*1	4
3	12			4	*4		*1	1	*1	1	
4	12					4	*1	*1	*1	*1	4
5	4						1	*1	*1	1	
[221]1	4						1	1	1	1	
2	12					4	1	*1	*1	1	4
3	12			4	4		1	1	*1	*1	
4	36		16	4	*4	4	1	*1	1	*1	*4
5	18	9	1	*1	1	*1	1	*1	1	*1	1
[21³]1	6			1	1		*1	*1	1	1	
2	18		4	1	*1	*4	*1	1	*1	1	4
3	36	9	1	*1	1	4	*4	4	*4	4	*4
4	60	*9	9	*9	9	4	*4	4	4	*4	4
[1⁵]	10	1	*1	1	*1	1	*1	1	1	*1	1

$[1^3]\otimes[11]=[221]\oplus[21^3]\oplus[1^5]$

S_5 5c [3]⊗[11]=[41]⊕[311]

		1,1									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[41]1	4	1	1	1	1						
2	60	*9	1	1	1	16	16	16			
3	30		*4	1	1	*4	1	1	9	9	
4	10			*1	1		*1	1	*1	1	4
[311]1	15	9	*1	*1	*1	1	1	1			
2	120		64	*16	*16	*4	1	1	9	9	
3	40			16	*16		*1	1	*1	1	4
4	8					4	*1	*1	1	1	
5	24						9	*9	*1	1	4
6	3								1	*1	1
[311]1	3								1	1	1
2	24						9	9	1	1	*4
3	8					4	1	*1	1	*1	
4	40			16	16		1	1	*1	*1	4
5	120		64	16	*16	4	1	*1	*9	9	
6	15	9	1	*1	1	1	*1	1			
[21³]1	10			1	1		*1	*1	1	1	*4
2	30		4	1	*1	*4	*1	1	9	*9	
3	60	9	1	*1	1	*16	16	*16			
4	4	1	*1	1	*1						

[1³]⊗[2]=[311]⊕[21³]

S_5 5d [21]⊗[2]=[41]⊕[32]⊕[311]⊕[221]

		1,1										2,1									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[41]1	6					1	1	1	1	1	1										
2	90		16	16	16	1	1	1	*1	*1	*1								12	12	12
3	180	36	4	*1	*1	4	*1	*1	1	1	*4			27	27		27	27	3	3	*12
4	60			1	*1		1	*1	1	*1		12	12	3	*3	12	3	*3	3	*3	
[32]1	18		1	1	1	1	1	1	*1	*1	*1								*3	*3	*3
2	576	36	4	*1	*1	64	*16	*16	16	16	*64			27	27		*108	*108	*12	*12	48
3	192			1	*1		16	*16	16	*16		12	12	3	*3	*48	*12	12	*12	12	
4	192	36	36	*9	*9	16	*4	*4	*4	*4	16			*27	*27						
5	64			9	*9		4	*4	*4	4		12	*12	*3	3						
[311]1	30		3	3	3	*3	*3	*3	3	3	3								*1	*1	*1
2	960	108	12	*3	*3	*192	48	48	*48	*48	192			81	81		*36	*36	*4	*4	16
3	320			3	*3		*48	48	*48	48		36	36	9	*9	*16	*4	4	*4	4	
4	64	12	*12	3	3									*1	*1		4	4	*4	*4	16
5	192			*27	27							36	*4	*1	1	16	4	*4	*36	36	
6	6												1	*1	1	1	*1	1			
[221]1	64	4	4	*1	*1	*16	4	4	4	4	*16			*3	*3						
2	64			3	*3		*12	12	12	*12		4	*4	*1	1						
3	64	12	*12	3	3									*1	*1		*4	*4	4	4	*16
4	192			*27	27							36	*4	*1	1	*16	*4	4	36	*36	
5	6												1	*1	1	*1	1	*1			

续表

S_5 5c [21]⊗[11]=[32]⊕[311]⊕[221]⊕[21³]

		1,1										2,1									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[32]1	6		1	1	1	1	1	1													
2	192	36	4	*1	*1	*16	4	4	36	36				27	27						
3	64			1	*1		*4	4	*4	4	16	12	12	3	*3						
4	64	*4	*4	1	1									3	3		12	12	12	12	
5	64			*3	3							*4	4	1	*1	16	4	*4	*4	4	16
[311]1	6		1	1	1	*1	*1	*1													
2	192	36	4	*1	*1	16	*4	*4	*36	*36				27	27						
3	64			1	*1		4	*4	4	*4	*16	12	12	3	*3						
4	320	*36	36	*9	*9	16	*4	*4	4	4				3	3		48	48	*48	*48	
5	960			81	*81		36	*36	*4	4	16	*108	12	3	*3	192	48	*48	48	*48	*192
6	30								1	*1	1		*3	3	*3	*3	3	*3	3	*3	3
[221]1	64	12	12	*3	*3									*9	*9		4	4	4	4	
2	192			27	*27							36	*36	*9	9	16	4	*4	*4	4	16
3	192	*12	12	*3	*3	48	*12	*12	12	12				1	1		*16	*16	16	16	
4	576			27	*27		108	*108	*12	12	48	*36	4	1	*1	*64	*16	16	*16	16	64
5	18								3	*3	3		*1	1	*1	1	*1	1	*1	1	*1
[21³]1	60	12	*12	3	3	12	*3	*3	3	3				*1	*1		1	1	*1	*1	
2	180			*27	27		27	*27	*3	3	12	36	*4	*1	1	4	1	*1	1	*1	*4
3	90								12	*12	12		16	*16	16	*1	1	*1	1	*1	1
4	6															1	*1	1	1	*1	1

S_6 6a $f_1=5,\ f_2=1$

$\omega(\delta\omega)$ $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	1(+) (12345, 6)	2(−) (12346, 5)	3(+) (12356, 4)	4(−) (12456, 3)	5(+) (13456, 2)	6(−) (23456, 1)

S_6 6b [5]⊗[1]=[6]⊕[51]

		1,1					
		1	2	3	4	5	6
[6]1	6	1	1	1	1	1	1
[51]1	30	25	*1	*1	*1	*1	*1
2	20		16	*1	*1	*1	*1
3	12			9	*1	*1	*1
4	6				4	*1	*1
5	2					1	*1

续表

S_6 7a $f_1=4,\ f_2=2$

$\omega(\delta\omega)$ $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	1(+) (1234, 56)	2(−) (1235, 46)	3(+) (1245, 36)	4(−) (1345, 26)	5(+) (2345, 16)	6(+) (1236, 45)	7(−) (1246, 35)	8(+) (1346, 25)
	9(−) (2346, 15)	10(+) (1256, 34)	11(−) (1356, 24)	12(+) (2356, 14)	13(+) (1456, 23)	14(−) (2456, 13)	15(+) (3456, 12)	

S_6 7b $[4]\otimes[2]=[6]\oplus[51]\oplus[42]$

		1, 1														
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
[6]	15	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
[51]1	30	4	4	4	4	4	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1
2	80	16	*1	*1	*1	*1	9	9	9	9	*4	*4	*4	*4	*4	*4
3	48		9	*1	*1	*1	9	*1	*1	*1	4	4	4	*4	*4	*4
4	24			4	*1	*1		4	*1	*1	4	*1	*1	1	1	*4
5	8				1	*1			1	*1		1	*1	1	*1	
[42]1	240	144	*9	*9	*9	*9	*9	*9	*9	*9	4	4	4	4	4	4
2	144		81	*9	*9	*9	*9	1	1	1	*4	*4	*4	4	4	4
3	72			36	*9	*9		*4	1	1	*4	1	1	*1	*1	4
4	24				9	*9			*1	1		*1	1	*1	1	
5	18						9	*1	*1	*1	*1	*1	*1	1	1	1
6	36							16	*4	*4	*4	1	1	*1	*1	4
7	12								4	*4		*1	1	*1	1	
8	12										4	*1	*1	*1	*1	4
9	4											1	*1	*1	1	

S_6 8a $f_1=3,\ f_2=3$

$\omega(\delta\omega)$ $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$	1(+) (123, 456)	2(−) (124, 356)	3(+) (134, 256)	4(−) (234, 156)	5(+) (125, 346)	6(−) (135, 246)	7(+) (235, 146)	8(+) (145, 236)	9(−) (245, 136)	10(+) (345, 126)
	11(−) (126, 345)	12(+) (136, 245)	13(−) (236, 145)	14(−) (146, 235)	15(+) (246, 135)	16(−) (346, 125)	17(+) (156, 234)	18(−) (256, 134)	19(+) (356, 124)	20(−) (456, 123)

S_6 8b $[3]\otimes[3]=[6]\oplus[51]\oplus[42]\oplus[33]$

		1, 1																			
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
[6]	20	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
[51]1	20	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	*1
2	120	9	9	9	9	*4	*4	*4	*4	*4	*4	4	4	4	4	4	4	*9	*9	*9	*9
3	72	9	*1	*1	*1	4	4	4	*4	*4	*4	4	4	4	*4	*4	*4	1	1	1	*9
4	36		4	*1	*1	4	*1	*1	1	1	*4	4	*1	*1	1	1	*4	1	1	*4	
5	12			1	*1		1	*1	1	*1			1	*1	1	*1		1	*1		
[42]1	120	9	9	9	9	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	9	9	9	9
2	72	9	*1	*1	*1	4	4	4	*4	*4	*4	*4	*4	*4	4	4	4	*1	*1	*1	9
3	36		4	*1	*1	4	*1	*1	1	1	*4	*4	1	1	*1	*1	4	*1	*1	4	
4	12			1	*1		1	*1	1	*1			*1	1	*1	1		*1	1		
5	36	9	*1	*1	*1	*1	*1	*1	1	1	1	1	1	1	*1	*1	*1	*1	*1	*1	9
6	72		16	*4	*4	*4	1	1	*1	*1	4	4	*1	*1	1	1	*4	*4	*4	16	
7	24			4	*4		*1	1	*1	1			1	*1	1	*1		*4	4		
8	24					4	*1	*1	*1	*1	4	4	*1	*1	*1	*1	4				
9	8						1	*1	*1	1			1	*1	*1	1					
[33]1	36	9	*1	*1	*1	*1	*1	*1	1	1	1	*1	*1	*1	1	1	1	1	1	1	*9
2	72		16	*4	*4	*4	1	1	*1	*1	4	*4	1	1	*1	*1	4	4	4	*16	
3	24			4	*4		*1	1	*1	1			*1	1	*1	1		4	*4		
4	24					4	*1	*1	*1	*1	4	*4	1	1	1	1	*4				
5	8						1	*1	*1	1			*1	1	1	*1					

§ 4.18 置换群 $S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 分类基和置换群表象变换系数

1. $S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 分类基

在很多具体问题中（例如后面 § 7·13 多粒子母分系数），还常用到置换群 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 分类基，$n=n_1+n_2$，我们称它为置换群非标准基(Jahn(1954))，并用以下记号代表之：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \tau[\nu_1]m_1[\nu_2]m_2\end{matrix}\right\rangle\equiv\left|[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\right\rangle,\quad \tau=1,2,\cdots\{\nu_1\nu_2\nu\}. \tag{4-165}$$

它属于 $S_{n_1+n_2}$ 群的 $IR[\nu]$，同时也是 $S_{n_1}=S_{n_1}(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1)$ 群的标准基 $[\nu_1]m_1$，$S_{n_2}=S_{n_2}(n_1+1,\ \cdots,\ n_1+n_2)$ 的标准基 $[\nu_2]m_2$，τ 为区分 $S_{n_1+n_2}$ 群 $IR[\nu]$ 向子群 $S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 的 IR 约化时，$([\nu_1],\ [\nu_2])$ 出现不止一次的情形．下面将证明 τ 的取值范围由 Littlewood 规则(4-136)决定．

根据(3-265)式，非标准基满足以下联立本征方程：

$$\begin{pmatrix}C(n_1+n_2)\\ C(n_1)\\ C(s_1)\\ C'(n_2)\\ C'(s_2)\end{pmatrix}\left|[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\right\rangle=\begin{pmatrix}\nu\\ \nu_1\\ m_1\\ \nu_2\\ m_2\end{pmatrix}\left|[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\right\rangle \tag{4-166}$$

$$\begin{aligned}&(C'(n_2);\ C'(s_2))=(C'(n_2);\ C'(n_2-1),\ \cdots,\ C'(2))\\ &C'(f)=\sum_{i>j=n_1+1}^{n_1+f}(ij),\quad f=n_2,\ n_2-1,\ \cdots,\ 2.\end{aligned} \tag{4-167}$$

注意 这里 $C(n_1+n_2)$ 为 $S_{n_1+n_2}$ 群的 $CSCO$-I，$(C(n_1),\ C(s_1))$ 为 S_{n_1} 群的 $CSCO$-II．

例 将(4-32a)给出的 S_4 群可约基组合成 $S_4\supset S_2\times S_2$ 分类基．根据(4-166)，把 $C(4)$，$C(2)=(12)$，$C'(2)=(34)$ 对角化，就可得到以下 $S_4\supset S_2\times S_2$ 分类基．

$$|[4],\ [2][2]\rangle=\frac{1}{2}(\varphi_1+\varphi_2+\varphi_3+\varphi_4),\qquad |[31],\ [2][11]\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_2),$$

$$|[31],\ [2][2]\rangle=\frac{1}{2}(\varphi_1+\varphi_2-\varphi_3-\varphi_4),\qquad |[31],\ [11][2]\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_3-\varphi_4).$$

2. 置换群标准基到非标准基的表象变换

通常不直接求出 S_n 群非标准基的明显表达式，而是将它表为 S_n 群标准基的线性组合．

$$\left|[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\right\rangle=\sum_m\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|\left.[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\right\rangle. \tag{4-168a}$$

量子数集 $(\tau,\ \nu_1,\ \nu_2,\ m_1,\ m_2)$ 用来标志 S_n 群非标准基的分量．上式中的系数为置换群标准基到非标准基的表象变换系数，记为 SNSTC (standard to non-standard transformation coefficients)．由于 S_n 群的标准基必为 S_{n_1} 群的标准基．因此只有当杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 中头 n_1 个数所占据的杨盘和杨盘 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$ 一致时，SNSTC $\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|[\nu]\,{}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ \ m_2}\Big\rangle$ 才不为零．因此(4-168a)中对 m 求和实为只对 Yamanouchi 数 $r_n,\ r_{n-1},\ \cdots r_{n_1+1}$ 求和．显然 $SNSTC$ 和量子数 m_1 无关，且配分 $[\nu_1]$ 决定于 $[\nu]m$ 和粒子数 n_2，因此 SNSTC 只明显依赖于 $[\nu]$，m，τ，$[\nu_2]m_2$，故可

简写为

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 m_2} \right\rangle = \langle [\nu] m | \tau, [\nu_2] m_2 \rangle \tag{4-169}$$

或表为

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle = \langle Y^{[\nu]}_m | [\nu]\tau, Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega^0_1) Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega^0_2) \rangle = \langle Y^{[\nu]}_m | \tau, Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega^0_2) \rangle. \tag{4-170}$$

注意上式和 S_n 群 ORC 的表达式(4-142b)的差别.

对给定 $\nu\nu_1 m_1 \nu_2 m_2$, 本征方程(4-166)的解不唯一时,需用附加指标 τ 区分,选取合适的线性组合,可使 τ 不同的解互相正交.因此非标准基(4-165)式也构成正交归一完备组,(4-168a)式中的 $SNSTC$ 为一幺正变换,满足幺正条件:

$$\sum_{\nu_2 m_2 \tau} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle = \delta_{mm'}, \tag{4-171a}$$

$$\sum_{m} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau'[\nu_1][\nu'_2]}_{m_1 \ m'_2} \right\rangle = \delta_{\nu_2\nu'_2}\delta_{m_2 m'_2}\delta_{\tau\tau'}. \tag{4-171b}$$

利用(4-171a)式,可将(4-168a)式逆展开:

$$\left| \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \right\rangle = \sum_{\nu_2 m_2 \tau} \left| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle. \tag{4-168b}$$

构造 $S_{n_1+n_2} \supset S_{n_1} \otimes S_{n_2}$ 分类基的另一种方法是利用酉群 CG 系数,见§7·14.

3. 表象变换系数的计算

$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle$是一个很重要的系数,$SU_n$ 群拉卡系数,9ν 系数(§7·14, §7·15), $SU_{mn} \supset SU_m \times SU_n\ ISF$(§7·16)和 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n\ ISF$(§7·17)中都要涉及这一系数.以往都采用投影算符法(Kaplan)计算 $SNSTC$,计算比较麻烦.下面给出另外两种方法.

(1) 本征函数法

由于(4-168a)式右边 $|[\nu]m\rangle$已经属于 $S_{n_1+n_2}$ 群 $IR[\nu]$,且是 S_{n_1} 群 IR 基$[\nu_1]m_1$.所以只要进一步把它组合成 S_{n_2} 的标准基$[\nu_2]m_2$就行了.即只要在$[\nu_1]m_1$为固定的 $\left| \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \right\rangle$ 基底上,将 S_{n_2} 的 CSCO-II$(C'(n_2), C'(s_2))$[(4-167)式]对角化就可求出 SNS:

$$\sum_{m'} \left[\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| \begin{matrix}C'(n_2)\\ C'(s_2)\end{matrix} \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix} \right\rangle - \begin{pmatrix}\nu_2\\ m_2\end{pmatrix} \delta_{mm'} \right] \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle = 0. \tag{4-172}$$

具体计算时, m_2 可先取某一特定值,对确定的$([\nu], [\nu_1]m_1, [\nu_2]m_2)$建立方程(4-172)式,由此求出系数$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m'_2} \right\rangle$,并使 τ 不同的解互相正交.由(4-35)式得:

$$|[\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m'_2}\rangle = \frac{1}{D^{[\nu_2]}_{m'_2 m_2}(T'_2)} [T_2 - D^{[\nu_2]}_{m_2 m_2}(T'_2)] \left| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1 \ m_2} \right\rangle,$$

$$T_2 = (i, i+1) \in S_{n_2}(n_1+1, \cdots, n_1+n_2); \quad T'_2 = (i-n_1, i-n_1+1) \in S_{n_2}(1, 2, \cdots, n_2). \tag{4-173}$$

由上式得：

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2'} \right\rangle = \frac{1}{D^{[\nu_2]}_{m_2'm_2}(T'_2)} \sum_{m'} [D^{[\nu]}_{m'm}(T'_2) - D^{[\nu_2]}_{m_2m_2}(T'_2)\delta_{mm'}] \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle. \tag{4-174}$$

因此对于给定的$[\nu]$，$[\nu_1]$和$[\nu_2]$知道了系数$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle$，就可由上式求出其它分量的系数$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1'\ m_2'} \right\rangle$等等．这一计算方法已经程序化(Chen, Collinson 和 Gao(1983))．关于位相约定见(4-179c)式．

(2) 利用 ORC 求表象变换系数

类似于(3-201)，即

$$\mathring{P}^{[\nu]m'}_{m} = \sqrt{\frac{h_\nu}{n!}} \sum_{a=1}^{n!} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| R_a \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix} \right\rangle R_a, \tag{4-175a}$$

我们引进一个 $S_n(n=n_1+n_2)$ 群非标准基到标准基的归一化投影算符

$$\mathring{P}^{[\nu],\tau[\nu_1]m_1'[\nu_2]m_2'}_{m} = \sqrt{\frac{h_\nu}{n!}} \sum_{Q_\omega p_1 p_2} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| Q_\omega p_1 p_2 \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1'\ m_2'} \right\rangle Q_\omega p_1 p_2. \tag{4-175b}$$

这里利用了 S_n 群置换算符按子群 $S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 的左陪集分解[对照(4-131)式]，$p_1\in S_{n_1}$，$p_2\in S_{n_2}$，Q_ω 为保序置换算符．在上式括号$\langle\ \ \rangle$内的 Q_ω 和 p_1 之间插进一个等于1的算符

$$\sum_{\nu_1' m_1 \nu_2' m_2 \tau'} \left| [\nu], {}^{\tau'[\nu_1'][\nu_2']}_{m_1\ m_2} \right\rangle \left\langle [\nu], {}^{\tau'[\nu_1'][\nu_2']}_{m_1\ m_2} \right| = 1$$

再利用$\langle [\nu], {}^{\tau'[\nu_1'][\nu_2']}_{m_1\ m_2} | p_1 p_2 | [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1'\ m_2'} \rangle = \delta_{\tau\tau'}\delta_{\nu_1\nu_1'}\delta_{\nu_2\nu_2'} D^{[\nu_1]}_{m_1m_1'}(p_1) D^{[\nu_2]}_{m_2m_2'}(p_2)$及(4-175a)式得：

$$\mathring{P}^{[\nu],\tau[\nu_1]m_1'[\nu_2]m_2'}_{m} = \sqrt{\frac{h_\nu}{h_{\nu_1}, h_{\nu_2}}} \sqrt{\frac{n_1!n_2!}{n!}} \sum_{m_1 m_2 \omega} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| Q_\omega \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle Q_\omega \mathring{P}^{[\nu_1]m_1'}_{m_1} \mathring{P}^{[\nu_2]m_2'}_{m_2}. \tag{4-176}$$

将它作用于单粒子态全不相同的正序态 $\Phi_0 = |i_1 i_2 \cdots i_n\rangle$上，并利用(3-225)式就得到

$$\begin{aligned}\Psi^{[\nu]\tau'}_{m} &= \mathring{P}^{[\nu],\tau[\nu_1]m_1'[\nu_2]m_2'}_{m} \Phi_0 \\ &= \sqrt{\frac{h_\nu}{h_{\nu_1}, h_{\nu_2}}} \sqrt{\frac{n_1!n_2!}{n!}} \sum_{m_1 m_2 \omega} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| Q_\omega \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle \psi^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1) \psi^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2),\end{aligned} \tag{4-177}$$

上式左边指标 τ' 用来区分选取不同的上指标 $\tau[\nu_1]m_1'[\nu_2]m_2'$ 进行投影时，所得的各组线性独立解．由于附加指标 τ' 的选取是任意的，我们就选 $\tau'=\tau$，比较(4-140)和(4-177)式得到：

$$C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1,\nu_2 m_2,\omega} = \sqrt{\frac{h_\nu}{h_{\nu_1}, h_{\nu_2}}} \sqrt{\frac{n_1!n_2!}{n!}} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| Q_\omega \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle, \tag{4-178a}$$

令上式中 $Q_\omega = e$(幺元素)，得到 $SNSTC$ 和 ORC 的关系：

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{m_1\ m_2} \right\rangle = \sqrt{\frac{h_{\nu_1} h_{\nu_2}}{h_\nu}} \sqrt{\frac{n!}{n_1!n_2!}} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1,\nu_2 m_2,\omega^0}. \tag{4-179a}$$

因此由 ORC 表，根据上式，立刻可求得表象变换系数．

我们还可定义 S_n 群标准基到 $S_n\supset S_{n_1}(\omega_1)\times S_{n_2}(\omega_2)$ 分类基的表象变换系数[1)]

1) 施义晋首先引进了这一广义的置换群表象变换系数．

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1 m_2} \right\rangle_{(\omega)} = \langle Y^{[\nu]}_m | [\nu]\tau,\ Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1) Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2) \rangle. \tag{4-178b}$$

由(4-178a)式得到它和 ORC 的关系

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ m_2} \right\rangle_{(\omega)} = \sqrt{\frac{h_{\nu_1} h_{\nu_2}}{h_\nu}} \sqrt{\frac{n!}{n_1!n_2!}}\, C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2, \omega}. \tag{4-179b}$$

(4-179a)式还证明了前面提到的(4-165)式中指标 τ 的取值范围的确由 Littlewood 规则所决定. 换言之,若$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$中包含 $S_{n_1+n_2}$ 群 $IR[\nu]$ $\{\nu_1\nu_2\nu\}$次, 则 $S_{n_1+n_2}$ 群 $IR[\nu]$中包含 S_{n_1} 和 S_{n_2} 的 $IR([\nu_1],\ [\nu_2])$亦为$\{\nu_1\nu_2\nu\}$次.

由于(4-179a)式,ORC 位相约定(4-148)也就决定了 $SNSTC$ 的位相规则:

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ 1} \right\rangle \Bigg|_{m=\min} > 0. \tag{4-179c}$$

由 ORC 对称性(4-162a, c)并注意到 $\delta_{\omega\omega'}=1$, 由(4-179a)立即得到 $SNSTC$ 的下列对称性

$$\left\langle \begin{matrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m}\end{matrix} \middle| [\tilde{\nu}],\ {}^{\tau[\tilde{\nu}_1][\tilde{\nu}_2]}_{\ \ \tilde{m}_1\ \tilde{m}_2} \right\rangle = \epsilon_3 \Lambda^{\nu}_{m} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ m_2} \right\rangle, \quad \text{当 } \nu_1,\ \nu_2,\ \nu \text{ 不全为自厄} \tag{4-180a}$$

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ \tilde{m}\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ \tilde{m}_1\ \tilde{m}_2} \right\rangle = \Lambda^{\nu}_{m} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{m_2} \sum_{\tau'} a_{\tau\tau'} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau'[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ m_2} \right\rangle, \text{当 } \nu_1,\ \nu_2,\ \nu \text{ 同时为自厄} \tag{4-180b}$$

根据(4-179c)和(4-180a)式, 位相因子 ϵ_3 由下式决定:

$$\epsilon_3 = \operatorname{sign}\left(\Lambda^{\nu}_{m} \Lambda^{\nu_1}_{m_1} \Lambda^{\nu_2}_{h_{\nu_2}} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ h_{\nu_2}} \right\rangle \Bigg|_{m=\max} \right). \tag{4-180c}$$

S_6 群以内的位相因子 ϵ_3 列在表 4.18-4.

若取 Jahn 的位相约定(见(4-67)式附注), 则对称性(4-180a)形式上更简单, 即

$$\left\langle \begin{matrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m}\end{matrix} \middle| [\tilde{\nu}],\ {}^{\tau[\tilde{\nu}_1][\tilde{\nu}_2]}_{\ \ \tilde{m}_1 \tilde{m}_2} \right\rangle = \epsilon'_3 \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ \ m_1\ m_2} \right\rangle. \tag{4-181}$$

(3) 特例:

(i) $n_2=1$. 这时 $SNSTC$ 非常简单. 当 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$ 刚好是杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 中去掉被 n 占据的方格后所剩下的杨盘 $Y^{[\nu'_1]}_{m'_1}$ 时, $SNSTC$ 为 1, 否则为零. 即

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ {}^{[\nu_1][1]}_{\ m_1} \right\rangle = \delta_{\nu_1\nu'_1} \delta_{m_1 m'_1}. \tag{4-182}$$

(ii) $n_2=2$. 这时 $m_2\equiv1$, 量子数 τ 为多余. 因此 $SNSTC$ 的记号可进一步简化为 $\langle[\nu]m|[\nu_2]\rangle$.

a. 当 n 和 $n-1$ 同在一行(列)时, 如果 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$ 刚好是 $Y^{[\nu]}_m$ 中去掉 n 和 $n-1$ 时所剩下的杨盘, 则$\langle[\nu]m|[2]\rangle$($\langle[\nu]m|[11]\rangle$)为 1, 否则为零.

b. 当 n 和 $n-1$ 既不在同一行, 也不在同一列时, 根据(4-166)式以及相邻置换不可约矩阵元的性质(4-14)式, 可知只要将置换算符$(n,\ n-1)$在二维基底$|Y^{[\nu]}_m\rangle$和$|Y^{[\nu]}_{m'}\rangle$=

$|(n,\ n-1)Y_{m}^{[\nu]}\rangle$上的表示矩阵对角化，就能求出表象变换系数．假定$Y_{m}^{[\nu]}$所对应的 Yamanouchi 数比$Y_{m'}^{[\nu]}$的大，由(4-17)得到对换$(n,\ n-1)$在此基底上的矩阵表示为

$$\mathscr{D}(n,\ n-1)=\begin{pmatrix} -\dfrac{1}{\sigma} & \dfrac{\sqrt{\sigma^2-1}}{\sigma} \\ \dfrac{\sqrt{\sigma^2-1}}{\sigma} & \dfrac{1}{\sigma}\end{pmatrix},\quad \begin{array}{l} \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \ & \ & \ & n' \\ \hline \ & n \\ \cline{1-2}\end{array}\ Y_{m}^{[\nu]}, \\ \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \ & \ & \ & n \\ \hline \ & n' \\ \cline{1-2}\end{array}\ Y_{m'}^{[\nu]}, \end{array}\quad n'=n-1. \tag{4-183}$$

式中σ为杨盘$Y_{m'}^{[\nu]}$中$n-1$到n的轴距，$\sigma>0$．将(4-183)式对角化，立即得到$SNSTC$：

SNSTC $\langle[\nu]m|[\nu_2]\rangle$，$[\nu_2]=[2]，[11]$

	[2]	[11]
$[\nu]m$	$\left(\frac{\sigma-1}{2\sigma}\right)^{1/2}$	$\left(\frac{\sigma+1}{2\sigma}\right)^{1/2}$
$[\nu]m'$	$\left(\frac{\sigma+1}{2\sigma}\right)^{1/2}$	$-\left(\frac{\sigma-1}{2\sigma}\right)^{1/2}$

(4-184)

(iii) 由(4-179a)和(4-163)可知，当$[\nu]=[n]$或$[1^n]$时，$SNSTC$特别简单，即

$$\langle[n]\,|\,[n];\ [n_1][n_2]\rangle=1,\qquad \langle[1^n]\,|\,[1^n];\ [1^{n_1}][1^{n_2}]\rangle=1$$

(4) 容易判断，某些系数值为1．例如：

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline 4&5\\ \cline{1-2} 6\\ \cline{1-1}\end{array}\ \middle|\ [321];\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline 4&5\\ \hline 6\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=1,\ \left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&4&6\\ \hline 2&5\\ \cline{1-2} 3\\ \cline{1-1}\end{array}\ \middle|\ [321];\ \begin{array}{|c|}\hline 1\\ \hline 2\\ \hline 3\\ \hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline 4&6\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=1, \tag{4-185}$$

这是显然的．因$\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\ \hline 4&5\\ \cline{1-2} 6\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$和$\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 4&5\\ \hline 6\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle$在$S_3(456)$群的作用下，变换性质完全相同(见(4-17)式)，所以前者必定是$S_3(456)$群IR基$[21]1$．(4-185)式可推广到粒子数更多的情形．如

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\ \hline 3&4&6\\ \hline 7&8\\ \cline{1-2} 9\\ \cline{1-1}\end{array}\ \middle|\ [3321];\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\ \hline 3&4&6\\ \hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline 7&8\\ \hline 9\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=1.$$

Horio(1964)给出了ν_1和ν_2为全对称表示时的$SNSTC$的代数表达式．

4．置换群表象变换系数表

表4·18-1至表4·18-3给出了S_6群以内的$SNSTC$表．表中略去了如(4-185)式那种显然为1的$SNSTC$．表中N为归一系数，所列出的数字为系数的平方值，* 号代表该系数为负值．例如由表2a得：

$$\left\langle \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&4&5\\ \hline 3\\ \cline{1-1}\end{array}\ \middle|\ [41];\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\ \hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline 3&4\\ \hline 5\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\left\langle \begin{matrix}[41]\\ 3\end{matrix}\ \middle|\ [41];\ {}^{[2][21]}_{\ 1\ \ \ 1}\right\rangle=-\sqrt{\frac{2}{18}}.$$

利用对称性(4-180a)可得到表中没列出的一些系数值

表 4·18　S_3–S_6 群表象变换系数表[1)]

1a　$[\nu]=[31]$

$[\nu];\nu_1,\nu_2 m_2$ \ $[\nu]m$	N	$\substack{123\\4}$	$\substack{124\\3}$	$\substack{134\\2}$
[31]; 1, 234	9	1	2	6
[31]; 1, $\substack{23\\4}$	36	32	*1	*3
1, $\substack{24\\3}$	4		3	*1

1b　$[\nu]=[22]$

	N	$\substack{12\\34}$	$\substack{13\\24}$
[22]; 1, $\substack{23\\4}$	4	1	3
1, $\substack{24\\3}$	4	3	*1

2a　$[\nu]=[41]$

	N	$\substack{1234\\5}$	$\substack{1235\\4}$	$\substack{1245\\3}$	$\substack{1345\\2}$
[41]; 1, 2345	48	3	5	10	30
1, $\substack{234\\5}$	144	135	*1	*2	*6
1, $\substack{235\\4}$	36		32	*1	*3
1, $\substack{245\\3}$	4			3	*1
[41]; 12, 345	18	3	5	10	
12, $\substack{34\\5}$	18	15	*1	*2	
12, $\substack{35\\4}$	3		2	*1	

2b　$[\nu]=[32]$

	N	$\substack{123\\45}$	$\substack{124\\35}$	$\substack{134\\25}$	$\substack{125\\34}$	$\substack{135\\24}$
[32]; 1, $\substack{234\\5}$	9	1	2	6		
1, $\substack{235\\4}$	144	32	*1	*3	27	81
1, $\substack{245\\3}$	16		3	*1	9	*3
1, $\substack{23\\45}$	48	32	*1	*3	*3	*9
1, $\substack{24\\35}$	16		9	*3	*3	1
[32]; 12, 345	9	1	2		6	
12, $\substack{34\\5}$	9	2	4		*3	
12, $\substack{35\\4}$	3	2	*1			

2c　$[\nu]=[311]$

$[\nu];\nu_1,\nu_2 m_2$ \ m	N	1	2	3	4	5	6
[311]; [1], [31]1	9	1	2	6			
[31]2	576	*32	1	3	135	405	
[31]3	192		*9	3	*15	5	160
[211]1	192	160	*5	*15	3	9	
[211]2	576		*405	*135	*3	1	32
[211]3	9				6	*2	1
[311]; [2], [21]1	3	1	2				
[21]2	18	*2	1		15		
[1^3]	18	10	*5		3		
[11], [21]1	18			15		*1	*2
[21]3	3					2	*1
[3]	18			3		5	10

3a　$[\nu]=[51]$

$[\nu],\nu_1,\nu_2 m_2$ \ m	N	1	2	3	4	5
[51]; [1][5]	50	2	3	5	10	30
[1][41]1	1200	1152	*3	*5	*10	*30
[41]2	144		135	*1	*2	*6
[41]3	36			32	*1	*3
[41]4	4				3	*1
[51]; [2][4]	20	2	3	5	10	
[2][31]1	180	162	*3	*5	*10	
[31]2	18		15	*1	*2	
[31]3	3			2	*1	
[51]; [3][3]	10	2	3	5		
[21]1	40	32	*3	*5		
[21]2	8		5	*3		

3b(i)　$[\nu]=[42]$

	N	1	2	3	4	5	6	7	8	9
[42]; [1][41]1	48	3	5	10	30					
[41]2	1296	135	*1	*2	*6	128	256	768		
[41]3	324		32	*1	*3	64	*2	*6	54	162
[41]4	36			3	*1		6	*2	18	*6
[42]; [1][32]1	162	135	*1	*2	*6	*2	*4	*12		
[32]2	1296		1024	*32	*96	*32	1	3	*27	*81
[32]3	144			96	*32		*3	1	*9	3
[32]4	48					32	*1	*3	*3	*9
[32]5	16						9	*3	*3	1

1) 一些显然为 1 的系数没有列入，例如$\left\langle{}^{1345}_{2}\right|[51],[11][3]\rangle=1$。

3b(ii)　$[\nu]=[42]$

m / $[\nu]\nu_1m_1\nu_2m_2$	N	1	2	3	5	6	8
[42]; [2], [4]	108	3	5	10	10	20	60
[2][31]1	108	15	25	50	*2	*4	*12
[31]2	54	15	*1	*2	8	16	*12
[31]3	9		2	*1	4	*2	
[2][22]1	27	15	*1	*2	*2	*4	3
[22]2	9		4	*2	*2	1	
[42]; [31,3]	18	3	5		10		
[21]1	72	15	25		*32		
[21]2	8	5	*3				
[21]1[3]	9			1		2	6
[21]1	36			32		*1	*3
[21]2	4					3	*1

3c(i)　$[\nu]=[411]$

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[411]; [1][41]1	48	3	5	10	30						
[41]2	3600	*135	1	2	6	384	768	2304			
[41]3	1800		*64	2	6	*96	3	9	405	1215	
[41]4	200			*6	2		*9	3	*15	5	160
[411]; [1][311]1	450	405	*3	*6	*18	2	4	12			
[311]2	14400		12288	*384	*1152	*32	1	3	135	405	
[311]3	4800			3456	*1152		*9	3	*15	5	160
[311]4	192					160	*5	*15	3	9	
[311]5	576						405	*135	*3	1	32
[311]6	9								6	*2	1

3c(ii)　$[\nu]=[411]$

	N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
[411]; [2][31]1	18	3	5	10							
[31]2	180	*15	1	2		54	108				
[31]3	60		*4	2		*6	3		45		
[211]1	60	45	*3	*6		2	4				
[211]2	180		108	*54		*2	1		15		
[211]3	18					10	*5		3		
$[1^2]$[4]	20				2			3		5	10
[31]1	180				162			*3		*5	*10
[31]2	18							15		*1	*2
[31]3	3									2	*1
[411]; [3][21]1	8	3	5								
[21]2	40	*5	3			32					
$[1^3]$	10	5	*3			2					
[21]1, [3]	10			2			3		5		
[21]1[21]1	40			32			*3		*5		
[21]2	8						5		*3		
[21]2, [3]	10				2			3		5	
[21]1	40				32			*3		*5	
[21]2	8							5		*3	

3d　$[\nu]=[33]$

	N	1	2	3	4	5
[33]; [1][32]1	9	1	2	6		
[32]2	144	32	*1	*3	27	81
[32]3	16		3	*1	9	*3
[32]4	48	32	*1	*3	*3	*9
[32]5	16		9	*3	*3	1
[2][31]1	9	1	2		6	
[31]2	9	2	4		*3	
[31]3	3	2	*1			
[21]1[21]1	4		1		3	
[21]2	4		3		*1	
[21]2, [21]1	4			1		3
[21]2	4			3		*1

续表

3e(i) $[\nu]=[321]$, $n_1=1$, $n_2=5$

	N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
[321]; [1][32]1	36	1	2	6			3	6	18								
[32]2	2304	128	*4	*12	108	324	*96	3	9	405	1215						
[32]3	256		12	*4	36	*12		*9	3	*15	5	160					
[32]4	768	*32	1	3	3	9							45	135	135	405	
[32]5	256		*9	3	3	*1							45	*15	*15	5	160
[1][311]1	36	3	6	18			*1	*2	*6								
[311]2	2304	384	*12	*36	324	97	32	*1	*3	*135	*405						
[311]3	768		108	*36	324	*108		9	*3	15	*5	*160					

3e(ii) $[\nu]=[321]$, $n_1=2$, $n_2=4$

	N	1	2	4	6	7	9	12	14
[321]; [2][31]1	9	1	2	6					
[31]2	576	*2	*4	3	54	108		405	
[31]3	192	*2	1		*6	3	45		135
[22]1	32	2	4	*3	6	12		*5	
[22]2	32	6	*3		*2	1	15		*5
[211]1	192	30	60	*45	*10	*20		27	
[211]2	576	270	*135		10	*5	*75		81
[211]3	18				10	*5	3		

3e(iii) $[\nu]=[321]$, $n_1=2$, $n_2=4$

	N	3	5	8	10	11	13	15	16
[321]; [11][31]1	18	0	0	3	5	10	0	0	0
[31]2	576	81	0	75	*5	*10	0	135	270
[31]3	192	0	27	0	20	*10	45	60	*30
[22]1	32	5	0	15	*1	*2	0	*3	*6
[22]2	32	0	5	0	12	*6	*3	*4	2
[211]1	192	135	0	*45	3	6	0	*1	*2
[211]2	576	0	405	0	*108	54	*3	*4	2
[211]3	9	0	0	0	0	0	6	*2	1

3e(iv) $[\nu]=[321]$, $n_1=3$, $n_2=3$

m	N	2	4	7	9	12	14	
[321]; [21]1[3]	32	1	3	3	5	5	15	[21]2[3]
[321]α; [21]1[21]1	64	9	27	3	5	*5	*15	α; [21]2, [21]1
[21]2	64	3	*1	25	*15	15	*5	[21]2
[321]β; [21]1[21]1	64	5	15	*15	*25	1	3	β; [21]2, [21]1
[21]2	64	*15	5	*5	3	27	*9	[21]2
[321]; [21]1[1^3]	32	15	*5	*5	3	3	*1	[21]2, [1^3]
	N	3	5	8	10	13	15	

1) 这里第一行指标m和左边表头相配合，最后一行的指标m和右边表头相配合.

2) $SNSTC$ 满足对称性

$$\left\langle \begin{matrix}[321]\\ \tilde{m}\end{matrix} \middle| [321]^{\alpha} \begin{matrix}[21]\\ \tilde{m}_1\end{matrix} \begin{matrix}[21]\\ \tilde{m}_2\end{matrix} \right\rangle = \Lambda_m^{[321]} \Lambda_{m_1}^{[21]} \Lambda_{m_2}^{[21]} \left\langle \begin{matrix}[321]\\ m\end{matrix} \middle| [321],^{\beta} \begin{matrix}[21]\\ m_1\end{matrix} \begin{matrix}[21]\\ m_2\end{matrix} \right\rangle.$$

表 4·18-4　(4-180a)式中的位相因子 ϵ_3

ν_1	ν_2	ν	ϵ_3	ν_1	ν_2	ν	ϵ_3	ν_1	ν_2	ν	ϵ_3	ν_1	ν_2	ν	ϵ_3
[1]	[3]	[31]	1	[1]	[5]	[51]	1	[3]	[3]	[42]	1	[3]	$[1^3]$	[411]	1
[1]	[21]		1	[1]	[41]		1	[3]	[21]		−1	[21]	[3]		1
[1]	[4]	[41]	−1	[2]	[4]		−1	[21]	[3]		1	[21]	[21]		1
[1]	[31]		1	[2]	[31]		1	[21]	[21]		1	[1]	[32]	[33]	1
[2]	[3]		1	[3]	[3]		1	[1]	[41]	[411]	−1	[2]	[31]		−1
[2]	[21]		1	[3]	[21]		1	[1]	[311]		1	[21]	[21]		1
[1]	[31]	[32]	1	[1]	[41]	[42]	−1	[2]	[31]		1				
[1]	[22]		1	[1]	[32]		1	[2]	[221]		1				
[2]	[3]		1	[2]	[4]		1	[11]	[4]		1				
[2]	[21]		−1	[2]	[31]		1	[11]	[31]		−1				
				[2]	[22]		1	[3]	[21]		−1				

§4.19　$S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 同位标量因子(ISF)

1. $S_n\supset S_{n-1}$ ISF

§4·11 给出的计算 S_n 群 CG 系数的办法是将整个 CG 系数一下子解出的方法. 根据 §3·16, 若已知 S_{n-1} 群 CG 系数, 则只要求出 $S_n\supset S_{n-1}ISF$, 就可得到 S_n 群的 CG 系数.

先引入以下记号. 下表给出 6 个群的不可约基的标志

表　4·19-1

$S_n(x)$	$S_{n-1}(x)$	$S_n(\xi)$	$S_{n-1}(\xi)$	$S_n(q)$	$S_{n-1}(q)$
$\left\lvert\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\right\rangle=\left\lvert\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma']m_1'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert\begin{matrix}[\sigma']\\ m_1'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\right\rangle=\left\lvert\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu']m_2'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert\begin{matrix}[\mu']\\ m_2'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rangle=\left\lvert\begin{matrix}[\nu]\\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert\begin{matrix}[\nu']\\ m'\end{matrix}\right\rangle$

这里 m_1, m_1' 等既可理解为杨盘, 又可理解为杨盘的编号. 由置换群分支律知

$$[\sigma]m_1=[\sigma][\sigma']m_1',\qquad [\mu]m_2=[\mu][\mu']m_2',\qquad [\nu]m=[\nu][\nu']m', \tag{4-186}$$

杨盘 $Y^{[\sigma']}_{m_1'}$ 为 $Y^{[\sigma]}_{m_1}$ 中去掉方块 n 后所得的一个盘, 等等. 例如

$$\left|\begin{matrix}[42]\\ 9\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}\boxed{1}\boxed{3}\boxed{5}\boxed{6}\\ \boxed{2}\boxed{4}\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[42]\\ [32]5\end{matrix}\right\rangle,\quad \left|\begin{matrix}[411]\\ 5\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}\boxed{1}\boxed{2}\boxed{3}\boxed{6}\\ \boxed{4}\\ \boxed{5}\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[411]\\ [311]1\end{matrix}\right\rangle.$$

杨盘编号见表 4·4-1.

首先用 S_{n-1} 群 CG 系数 $C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}$ 把 $S_n(x)$ 和 $S_n(\xi)$ 的 IR 基线性组合成 $S_{n-1}(q)$ 群的 IR 基 $[\nu']m'$

$$|(\sigma'\mu')\beta'\rangle\equiv\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\beta'}_{m'}\equiv\sum_{m_1'm_2'}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma']m_1'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu']m_2'\end{matrix}\right\rangle, \tag{4-187}$$

然后再用 $S_n\supset S_{n-1}ISF$ $C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$ 将(4-187)式线性组合成 $S_n(q)$ 的 IR 基 $[\nu]m$,

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ m\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\sigma'\mu'\beta'}C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\beta'}_{m'} \tag{4-188}$$

S_n 群 CG 系数可表为(比较(3-303)式)

$$C^{[\nu]\beta,m}_{[\sigma]m_1,[\mu]m_2}=\sum_{\beta'}C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}C^{[\nu']\beta',m'}_{[\sigma']m_1',[\mu']m_2'}. \tag{4-189a}$$

例如

$$C^{[42]\beta,9}_{[411]5,[411]7}=\sum_{\beta'}C^{[42]\beta,[32]\beta'}_{[411][311],[411][311]}C^{[32]\beta',5}_{[311]1,[311]3}.$$

由(4-189a)式得

$$C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=\sum_{m_1m_2}C^{[\nu]\beta,m}_{[\sigma]m_1,[\mu]m_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{[\sigma']m_1',[\mu']m_2'}. \tag{4-189b}$$

若多重性指标 β' 为多余的，则由(4-189a)式得

$$C^{[\nu]\beta,[\nu']}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=C^{[\nu]\beta,m}_{[\sigma]m_1,[\mu]m_2}/C^{[\nu']m'}_{[\sigma']m_1',[\mu']m_2'}. \tag{4-189c}$$

$S_n\supset S_{n-1}ISF$ 满足幺正性(3-305)、(3-306)式.(4-188)式可逆展开：

$$\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\beta'}_{m'}=\sum_{\nu\beta}C^{[\nu]\beta[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle. \tag{4-190}$$

下面导出 $C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$ 所满足的本征方程. 利用 $C(n)=C(n-1)+\sum\limits_{i=1}^{n-1}(in)$，以及(4-188)式为 $C(n)$ 和 $C(n-1)$ 的本征函数，本征值分别为 ν 和 ν'，得到：

$$\sum_{i=1}^{n-1}(in)\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle=(\nu-\nu')\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle. \tag{4-191}$$

因此，只需将算符 $\sum\limits_{i=1}^{n-1}(in)$ 在基 $|(\sigma'\mu')\beta'\rangle$(4-187)式上的矩阵对角化就可求出 $S_n\supset S_{n-1}ISF$：

$$\sum_{\sigma'\mu'\beta'}\left[\sum_{i=1}^{n-1}\langle(\bar{\sigma}'\bar{\mu}')\bar{\beta}'|(in)|(\sigma'\mu')\beta'\rangle-(\nu-\nu')\delta_{\bar{\beta}'\beta'}\delta_{\bar{\sigma}'\sigma'}\delta_{\bar{\mu}'\mu'}\right]C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=0, \tag{4-192}$$

$$\beta=1,\ 2,\ \cdots(\sigma\mu\nu),\qquad \beta'=1,\ 2,\ \cdots(\sigma'\mu'\nu').$$

由(4-187)式得：

$$\langle(\bar{\sigma}'\bar{\mu}')\bar{\beta}'|(in)|(\sigma'\mu')\beta'\rangle=\sum_{\bar{m}_1\bar{m}_2m_1m_2}C^{[\nu']\bar{\beta}',m'}_{\bar{\sigma}'\bar{m}_1,\bar{\mu}'\bar{m}_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1,\mu'm_2}D^{[\sigma]}_{\bar{m}_1m_1}(in)D^{[\mu]}_{\bar{m}_2m_2}(in). \tag{4-193}$$

注意，这里量子数之间仍需满足(4-186)式.

对给定 σ, μ 和 ν'，我们建立本征方程(4-192)，其阶数 $l=\sum\limits_{\sigma'\mu'}(\sigma'\mu'\nu')$. 我们知道 CG 系数所满足的本征方程(4-93)的阶数 $L=h_\sigma h_\mu$. $l\ll L$. 例如对 S_6 群，可能出现的最大 l 为 $l_{\max}=13$，而 $L_{\max}=256$. 因此先求 ISF，再求 CG 系数，比直接由(4-93)式求 CG 系数要容易得多. 从一看而知的 S_2 群的 CG 系数出发，相继地交替应用(4-193)式和(4-189a)式，便可求出 $S_n\supset S_{n-1}ISF$ 和 S_n 群 CG 系数. 这一方法的计算程序亦已建立(Chen, Gao, Shi, Vallieros 和 Feng).

$S_n\supset S_{n-1}ISF$ 也就是 Hamermesh 定义的 K 系数(Hamermesh p. 270, Harvey 1981)，他给出了计算该系数的递推公式.

例 1 由(4-189c)求 $S_5\supset S_4ISF$.

利用 CG 系数表 4·13-3

$$C^{[221],[22]}_{[41],[4],[32][22]}=\left\langle\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline 5\\\cline{1-1}\end{array}\ \middle|\ \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline 5\\\cline{1-1}\end{array}\ \ \begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&5\\\hline 3&4\\\cline{1-2}\end{array}\right\rangle\Bigg/\left\langle\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}\ \middle|\ \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array}\ \ \begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}\right\rangle$$

$$=C^{[221]1}_{[41]1,[32]4}/C^{[22]1}_{[4]1,[22]1}=\sqrt{\frac{10}{16}}\Big/1=\sqrt{\frac{5}{8}}.$$

$$C^{[221],[22]}_{[41][31],[32][31]}=\left\langle\begin{smallmatrix}1&2\\3&4\\5\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}1&2&3&5\\4\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}1&2&4\\3&5\end{smallmatrix}\right\rangle\Big/\left\langle\begin{smallmatrix}1&2\\3&4\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}1&2&3\\4\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}1&2&4\\3\end{smallmatrix}\right\rangle$$

$$=C^{[221]1}_{[41]2,[32]2}/C^{[22]1}_{[31]1,[31]2}=-\sqrt{\frac{2}{16}}\Big/\sqrt{\frac{2}{6}}=-\sqrt{\frac{3}{8}}.$$

例 2 由方程(4-191)求 $S_4\supset S_3$ ISF $C^{[31],[21]}_{[31][\sigma'],[22][\mu']}$.

根据分支律知$[\sigma']=[3]$, $[21]$; $[\mu']=[21]$. 解方程(4-191)时, m' 值可任意取. 我们就取 $m'=1$(第一分量). 令

$$\varphi_1=\left[\left|\begin{matrix}[31]\\[3]\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[22]\\[21]\end{matrix}\right\rangle\right]^{[21]}_{1}=\left|\begin{smallmatrix}1&2&3\\4\end{smallmatrix}\right\rangle\left|\begin{smallmatrix}1&2\\3&4\end{smallmatrix}\right\rangle;\tag{4-194a}$$

$$\varphi_2=\left[\left|\begin{matrix}[31]\\[21]\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[22]\\[21]\end{matrix}\right\rangle\right]^{[21]}_{[1]}=-\sqrt{\frac{1}{2}}\left[\left|\begin{smallmatrix}1&2&4\\3\end{smallmatrix}\right\rangle\left|\begin{smallmatrix}1&2\\3&4\end{smallmatrix}\right\rangle-\left|\begin{smallmatrix}1&3&4\\2\end{smallmatrix}\right\rangle\left|\begin{smallmatrix}1&3\\2&4\end{smallmatrix}\right\rangle\right].\tag{4-194b}$$

这里利用了(4-187)式及 S_3 群 CG 系数 表 4·13-1. 利用 S_4 群 IR 矩阵元 表 4·4-2 求得算符$[(14)+(24)+(34)]$在 φ_1, φ_2 基上的矩阵为$\begin{pmatrix}0&2\\2&0\end{pmatrix}$, 将它对角化得到本征值 $\nu=2$, -2, 对应于[31]和[211]表示. 求出相应的系数得到

$$\left|\begin{matrix}[31]\\[21]1\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{smallmatrix}1&2&4\\3\end{smallmatrix}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1+\varphi_2),\quad\left|\begin{matrix}[211]\\[21]1\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{smallmatrix}1&2\\3\\4\end{smallmatrix}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}(\varphi_1-\varphi_2)$$

将(4-194)式代入上式, 容易看出和 S_4 群 CG 系数表 4·13-2b 一致.

§ 7·16 将证明, $S_n\supset S_{n-1}$ ISF 就是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 单粒子母分系数.

2. 位相约定

(1) 绝对位相: 首先按杨图的行长将配分数编号, 如 $n=5$, 配分编号次序为[5], [41], [32], [311], [221], $[21^3]$, $[1^5]$. 对一对配分数($[\sigma']$, $[\mu']$), 进行类似的编号. 如 $n=5$ 编号次序为([5], [5]), ([5], [41]), …([5] $[1^5]$), ([41], [5]), ([41], [41])…($[1^5]$, $[1^5]$). 对固定$[\nu]\beta$, 及编号最小的$[\nu']$, 要求矢量$\{C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}\}$(分量指标为($\beta'[\sigma'][\mu']$))的头一个非零分量为正值.

不难看出这一绝对位相约定是和置换群 CG 系数的绝对位相约定(4-148)相自洽的. (换言之, 利用这一位相约定下的 ISF, 代入(4-189a)式, 用递推方式计算出来的 CG 系数满足位相约定(4-148)式.)

(2) 相对位相: 要求相对位相为 Yamanouchi 标准位相, 由(4-188)式得

$$D^{[\nu]}_{\bar{m}m}(n-1,\ n)=\left\langle\begin{matrix}[\nu]\beta\\\bar{m}\end{matrix}\middle|p_{nn-1}\middle|\begin{matrix}[\nu]\beta\\m\end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{\sigma'\mu'\beta'\bar{\sigma}'\bar{\mu}'\bar{\beta}'}C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}C^{[\nu]\beta,[\bar{\nu}']\bar{\beta}'}_{\sigma\bar{\sigma}',\mu\bar{\mu}'}M(\bar{\sigma}'\bar{\mu}'\bar{\beta}'\bar{\nu}'\bar{m}',\ \sigma'\mu'\beta'\nu'm'),\tag{4-195a}$$

这里

$$M(\bar{\sigma}'\bar{\mu}'\bar{\beta}'\bar{\nu}'\bar{m}',\ \sigma'\mu'\beta'\nu'm')=\sum_{\bar{m}_1'\bar{m}_2'm_1'm_2'}C^{[\bar{\nu}']\bar{\beta}',\bar{m}'}_{\bar{\sigma}'\bar{m}_1',\bar{\mu}'\bar{m}_2'}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}D^{[\sigma]}_{\bar{m}_1m_1}(n-1,\ n)D^{[\mu]}_{\bar{m}_2m_2}(n-1,\ n).\tag{4-195b}$$

因此

$$C^{(\nu)\beta,(\bar{\nu}')\bar{\beta}'}_{\sigma\bar{\sigma}',\mu\bar{\mu}'}=[D^{[\nu]}_{\overline{m}m}(n-1,\ n)]^{-1}\sum_{\sigma'\mu'\beta'}M(\bar{\sigma}'\bar{\mu}'\bar{\beta}'\bar{\nu}'\overline{m}',\ \sigma'\mu'\nu'm)C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}. \qquad (4\text{–}195c)$$

这里$[\nu]\overline{m}=[\nu][\bar{\nu}']\overline{m}'$, $[\nu]m=[\nu][\nu']m'$. 将(4–195c)两边乘以$C^{(\bar{\nu})\bar{\beta},(\bar{\nu}')\bar{\beta}'}_{\sigma\bar{\sigma}',\mu\bar{\mu}'}$并对$\bar{\sigma}'$, $\bar{\mu}'$, $\bar{\beta}'$求和,就回到(4–195b)式. 由此可知(4–195c)成立.

于是,计算具有正确相对位相的ISF的方法可归纳为:对给定σ, μ,对每一(ν)和β我们只需从本征方程(4–192)求得ν'编号为最小的ISF $C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$,其余的$ISF$可利用(4–195c′)式求出. 在使用(4–195c)式时,$\overline{m}'$可任意取,如取为第一分量$\overline{m}'=1$. 利用$[\nu]\overline{m}=[\nu][\bar{\nu}']\overline{m}$由$\overline{m}'$和$\bar{\nu}'$可定出$\overline{m}$,而$m$值则由$Y^{[\nu]}_{m}=(n-1,\ n)Y^{[\nu]}_{\overline{m}}$定出.

3. $S_n\supset S_{n-1}$ ISF 的性质

(1) 由(3–305)和(3–306)得到ISF的幺正性

$$\begin{aligned}&\sum_{\sigma'\mu'\beta'}C^{(\nu)\beta(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}C^{(\bar{\nu})\bar{\beta},(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=\delta_{\nu\bar{\nu}}\delta_{\beta\bar{\beta}}\\&\sum_{\nu\beta}C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}C^{(\nu)\beta,(\nu')\bar{\beta}'}_{\sigma\bar{\sigma}',\mu\bar{\mu}'}=\delta_{\sigma'\bar{\sigma}'}\delta_{\mu'\bar{\mu}'}\delta_{\beta'\bar{\beta}'}\end{aligned} \qquad (4\text{–}196a)$$

利用(4–189)式,根据CG系数的性质(4–116)式至(4–122)式,我们得到ISF的以下性质.

(2)
$$C^{(\nu)\beta(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=\epsilon'_1C^{(\nu)\beta(\nu')\beta'}_{\mu\mu',\sigma\sigma'} \qquad (4\text{–}196b)$$

(3)
$$\sqrt{\frac{h_{\nu'}}{h_\nu}}\ C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=\epsilon'_2\sqrt{\frac{h_{\sigma'}}{h_\sigma}}\ C^{(\sigma)\beta,(\sigma')\beta'}_{\nu\nu',\mu\mu'}=\epsilon'_3\sqrt{\frac{h_{\mu'}}{h_\mu}}\ C^{(\mu)\beta,(\mu')\beta'}_{\sigma\sigma',\nu\nu'} \qquad (4\text{–}196c)$$

(4)
$$C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\sigma\sigma'\mu\mu'}=\epsilon'_4C^{(\nu)\beta,(\nu')\beta'}_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}',\bar{\mu}\bar{\mu}'}=\epsilon'_5C^{(\bar{\nu})\beta,(\bar{\nu}')\beta'}_{\sigma\sigma'\bar{\mu}\bar{\mu}'}=\epsilon'_6C^{(\bar{\nu})\beta(\bar{\nu}')\beta'}_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}',\mu\mu'} \qquad (4\text{–}196d)$$

上述式子中相因子ϵ'_i可用CG系数对称性的相因子ϵ_i表示出来,

$$\epsilon'_i=\epsilon_i(\sigma\mu\nu_\beta)\epsilon_i(\sigma'\mu'\nu'_{\beta'}),\qquad i=1,\ 2,\ \cdots,\ 6, \qquad (4\text{–}196e)$$

注意,ϵ'_i不仅依赖于σ, μ, ν和β,而且依赖于σ', μ', ν'和β'.

对多重性大于1的情形,上述对称性不是自动满足的,只有适当选择(4–192)式的本征解,才能满足这些对称性. 要求ISF满足这些对称性常常可部分消除或完全消除在选择本征解上的部分任意性.

4. 特例

$$C^{[\nu],[\nu']}_{[n][n-1],[\mu][\mu']}=\delta_{\nu\mu}\delta_{\nu'\mu'},\qquad C^{[\nu],[\nu']}_{[1^n][1^{n-1}],[\mu][\mu']}=\delta_{\nu\bar{\mu}}\delta_{\nu'\bar{\mu}'} \qquad (4\text{–}196f)$$

$$C^{[n][n-1]}_{[\sigma][\sigma'],[\mu][\mu']}=(h_{\sigma'}/h_\sigma)^{1/2}\delta_{\sigma\mu}\delta_{\sigma'\mu'},\quad C^{[1^n][1^{n-1}]}_{[\sigma][\sigma'],[\mu][\mu']}=(h_{\sigma'}/h_\sigma)^{1/2}\delta_{\sigma\bar{\mu}}\delta_{\sigma'\bar{\mu}'}. \qquad (4\text{–}196g)$$

(4–196f)式是显见的,而(4–196g)来自(4–196f)和(4–196b).

5. $S_n\supset S_{n-1}$ ISF表

下面给出S_5群以内的$S_n\supset S_{n-1}ISF$表, S_6群以内的$S_n\supset S_{n-1}ISF$表见Chen等(1984). 由(4–196f), (4–196g)就可得到的ISF没有列入表内. 表的先后次序是根据$[\sigma]$, $[\mu]$和$[\nu']$的次序而安排的. 表头的意义是:

$[\sigma][\mu]$	$[\nu']$
	$[\nu]_\beta$
$[\sigma'][\mu']$	

如果$\beta'>1$则用

$[\sigma][\mu]$	$[\nu']$
	$[\nu]_\beta$
$[\sigma'][\mu']$ $[\sigma'][\mu']$ ……	

这里头一次出现的$[\sigma'][\mu']$指$\beta'=1$, 第二次出现的同一$[\sigma'][\mu']$指$\beta'=2$等. 表中列出的为系数的平方值,带负号者代表该系数为负.

表 4·19 $S_n \supset S_{n-1}$ ISF 表, $n \leqslant 5$(即 5 个粒子以内的 $SU_{mn} \supset SU_m \times SU_n$ 单粒子母分系数表, m, n 为任意值)

S_3: 1a [21]×[21]

[21][21]	[2]	
$\sigma\,\mu'$ \ ν	[3]	[21]
[2][2]	1/2	1/2
[11][11]	1/2	−1/2

1b

[21][21]	[11]	
$\sigma'\mu'$ \ ν	[21]	[1³]
[2][11]	−1/2	1/2
[11][2]	−1/2	−1/2

S_4: 2a [31]×[31]

[31][31]	[3]	
	[4]	[31]
[3][3]	1/3	2/3
[21][21]	2/3	−1/3

2b

[31][31]	[21]		
	[31]	[22]	[211]
[3][21]	−1/6	1/3	1/2
[21][3]	−1/6	1/3	−1/2
[21][21]	2/3	1/3	

2c

[31][31]	[1³]
	[211]
[21][21]	1

3a [31]×[22]

[31][22]	[3]
	[31]
[21][21]	1

3b

[31][22]	[21]	
	[31]	[211]
[3][21]	1/2	1/2
[21][21]	1/2	−1/2

3c

[31][22]	[1³]
	[211]
[21][21]	−1

4a [31]×[211]

[31][211]	[3]
	[31]
[21][21]	1

4b

[31][211]	[21]		
	[31]	[22]	[211]
[3][21]	−1/2	1/3	1/6
[21][21]		−1/3	2/3
[21][1³]	1/2	1/3	1/6

4c

[31][211]	[1³]	
	[211]	[1⁴]
[3][1³]	−2/3	1/3
[21][21]	−1/3	−2/3

5a [22]×[22]

[22][22]	[3]
	[4]
[21][21]	1

5b

[22][22]	[21]
	[22]
[21][21]	1

5c

[22][22]	[1³]
	[1⁴]
[21][21]	1

6a [22]×[211]

[22][211]	[3]
	[31]
[21][21]	1

6b

[22][211]	[21]	
	[31]	[211]
[21][21]	−1/2	1/2
[21][1³]	−1/2	−1/2

6c

[22][211]	[1³]
	[211]
[21][21]	1

7a [211]×[211]

[211][211]	[3]	
	[4]	[31]
[21][21]	2/3	1/3
[1³][1³]	1/3	−2/3

7b

[211][211]	[21]		
	[31]	[22]	[211]
[21][21]	2/3	1/3	
$[21][1^3]$	−1/6	1/3	1/2
$[1^3][21]$	−1/6	1/3	−1/2

7c

[211][211]	$[1^3]$
	[211]
[21][21]	1

S_5: 8a [41]×[41]

[41][41]	[4]	
	[5]	[41]
[4][4]	1/4	3/4
[31][31]	3/4	−1/4

8b

[41][41]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[4][31]	−1/12	5/12	1/2
[31][4]	−1/12	5/12	−1/2
[31][31]	5/6	1/6	

8c

[41][41]	[22]
	[32]
[31][31]	1

8d

[41][41]	[211]
	[311]
[31][31]	1

9a [41]×[32]

[41][32]	[4]
	[41]
[31][31]	1

9b

[41][32]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[4][31]	1/3	1/6	1/2
[31][31]	2/15	5/12	−9/20
[31][22]	8/15	−5/12	−1/20

9c

[41][32]	[22]	
	[32]	[221]
[4][22]	−3/8	5/8
[31][31]	−5/8	−3/8

9d

[41][32]	[211]	
	[311]	[221]
[31][31]	−1/4	3/4
[31][22]	3/4	1/4

10a [41]×[311]

[41][311]	[4]
	[41]
[31][31]	1

10b

[41][311]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[4][31]	−1/3	5/12	1/4
[31][31]		−3/8	5/8
[31][211]	2/3	5/24	1/8

10c

[41][311]	[22]	
	[32]	[221]
[31][31]	−1/16	15/16
[31][211]	15/16	1/16

10d

[41][311]	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[4][211]	−1/4	5/12	1/3
[31][31]	−1/8	5/24	−2/3
[31][211]	5/8	3/8	

10e

[41][311]	$[1^4]$
	$[21^3]$
[31][211]	1

S_5: 11*a* [41]×[221]

[41][221]	[31]	
	[32]	[311]
[31][22]	1/4	3/4
[31][211]	3/4	−1/4

11*b*

[41][221]	[22]	
	[32]	[221]
[4][22]	−5/8	3/8
[31][211]	−3/8	−5/8

11*c*

[41][221]	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[4][211]	1/2	−1/6	1/3
[31][22]	1/20	−5/12	−8/15
[31][211]	9/20	5/12	−2/15

11*d*

[41][221]	$[1^4]$
	$[21^3]$
[31][211]	−1

12*a* $[41]\times[21^3]$

$[41][21^3]$	[31]
	[311]
[31][211]	1

12*b*

$[41][21^3]$	[22]
	[221]
[31][211]	1

12*c*

$[41][21^3]$	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[4][211]	1/2	−5/12	1/12
[31][211]	0	1/6	5/6
$[31][1^4]$	1/2	5/12	−1/12

12*d*

$[41][21^3]$	$[1^4]$	
	$[21^3]$	$[1^5]$
$[4][1^4]$	−3/4	1/4
[31][211]	−1/4	−3/4

13*a* [32]×[32]

[32][32]	[4]	
	[5]	[41]
[31][31]	3/5	2/5
[22][22]	2/5	−3/5

13*b*

[32][32]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[31][31]	1/3	2/3	0
[31][22]	−1/3	1/6	1/2
[22][31]	−1/3	1/6	−1/2

13*c*

[32][32]	[22]	
	[32]	[221]
[31][31]	1/4	3/4
[22][22]	3/4	−1/4

13*d*

[32][32]	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[31][31]	2/5	0	3/5
[31][22]	3/10	1/2	−1/5
[22][31]	−3/10	1/2	1/5

13*e*

[32][32]	$[1^4]$
	$[21^3]$
[22][22]	1

14*a* [32]×[311]

[32][311]	[4]
	[41]
[31][31]	1

14*b*

[32][311]	[31]			
	[41]	[32]	[311]α	[311]β
[31][31]	−3/10	0	3/5	1/10
[31][211]	−1/6	1/3	0	−1/2
[22][31]	−1/30	5/12	−3/20	2/5
[22][211]	1/2	1/4	1/4	0

续表

14c

[32][311]	[22]	
	[32]	[221]
[31][31]	−5/8	3/8
[31][211]	−3/8	−5/8

14d

[32][311]	[211]			
	[311]α	[311]β	[221]	$[21^3]$
[31][31]	0	1/2	−1/3	1/6
[31][211]	−3/5	1/10	0	−3/10
[22][31]	1/4	0	−1/4	−1/2
[22][211]	3/20	2/5	5/12	−1/30

14e

[32][311]	$[1^4]$
	$[21^3]$
[31][211]	1

15a [32]×[221]

[32][221]	[4]
	[41]
[22][22]	1

15b

[32][221]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[31][22]	−1/5	1/2	3/10
[31][211]	3/5	0	2/5
[22][211]	1/5	1/2	−3/10

15c

[32][221]	[22]	
	[32]	[221]
[31][211]	3/4	1/4
[22][22]	−1/4	3/4

15d

[32][221]	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[31][22]	−1/2	1/6	1/3
[31][211]	0	2/3	−1/3
[22][211]	1/2	1/6	1/3

15e

[32][221]	$[1^4]$	
	$[21^3]$	$[1^5]$
[31][211]	−2/5	3/5
[22][22]	3/5	2/5

16a $[32]\times[21^3]$

$[32][21^3]$	[31]	
	[32]	[311]
[31][211]	3/4	1/4
[22][211]	−1/4	3/4

16b

$[32][21^3]$	[22]	
	[32]	[221]
[31][211]	3/8	5/8
$[22][1^4]$	5/8	−3/8

16c

$[32][21^3]$	[211]		
	[311]	[221]	$[21^3]$
[31][211]	9/20	−5/12	2/15
$[31][1^4]$	−1/2	−1/6	1/3
[22][211]	1/20	5/12	8/15

16d

$[32][21^3]$	$[1^4]$
	$[21^3]$
[32][211]	1

17a [311]×[311]

[311][311]	[4]	
	[5]	[41]
[31][31]	1/2	1/2
[211][311]	1/2	−1/2

17b

[311][311]	[31]			
	[41]	[32]α	[32]β	[311]
[31][31]	5/12	1/2	1/12	0
[31][211]	−1/12	0	5/12	1/2
[211][31]	−1/12	0	5/12	−1/2
[211][211]	5/12	−1/2	1/12	0

17c

[311][311]	[22]			
	[32]α	[32]β	[221]α	[221]β
[31][31]	−3/16	1/2	5/16	0
[31][211]	5/16	0	3/16	1/2
[211][31]	5/16	0	3/16	−1/2
[211][211]	3/16	1/2	−5/16	0

17d

[311] [311]	[211]			
	[311]	[221]α	[221]β	[21^3]
[31] [31]	1/2	0	−5/12	1/12
[31] [211]	0	−1/2	1/12	5/12
[211] [31]	0	−1/2	−1/12	−5/12
[211] [211]	1/2	0	5/12	−1/12

17e

[311] [311]	[1^4]	
	[21^3]	[1^5]
[31] [211]	1/2	1/2
[211] [31]	−1/2	1/2

18a [311] × [221]

[311] [221]	[4]
	[41]
[211] [211]	1

18b

[311] [221]	[31]			
	[41]	[32]	[311]α	[311]β
[31] [22]	1/2	1/4	1/4	0
[31] [211]	1/6	−1/3	0	1/2
[211] [22]	1/30	−5/12	3/20	−2/5
[211] [211]	3/10	0	−3/5	−1/10

18c

[311] [221]	[22]	
	[32]	[221]
[31] [211]	−3/8	5/8
[211] [211]	5/8	3/8

18d

[311] [221]	[211]			
	[311]α	[311]β	[221]	[21^3]
[31] [22]	3/20	2/5	−5/12	1/30
[31] [211]	−3/5	1/10	0	3/10
[211] [22]	−1/4	0	−1/4	−1/2
[211] [211]	0	−1/2	1/3	1/6

18e

[311] [221]	[1^4]
	[21^3]
[31] [211]	−1

19a [311] × [21^3]

[311] [21^3]	[4]
	[41]
[211] [211]	1

19b

[311] [21^3]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[31] [211]	−2/3	5/24	1/8
[211] [211]	0	−3/8	5/8
[211] [1^4]	1/3	5/12	1/4

19c

[311] [21^3]	[32]	
	[32]	[221]
[31] [211]	−15/16	1/16
[211] [211]	−1/16	−15/16

19d

[311] [21^3]	[211]		
	[311]	[221]	[21^3]
[31] [211]	−5/8	3/8	0
[31] [1^4]	−1/4	−5/12	1/3
[211] [211]	−1/8	−5/24	−2/3

19e

[311] [21^3]	[1^4]
	[21^3]
[31] [211]	−1

20a [221] × [221]

[221] [221]	[4]	
	[5]	[41]
[22] [22]	2/5	3/5
[211] [211]	3/5	−2/5

20b

[221] [221]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[22] [211]	−1/3	1/6	1/2
[211] [22]	−1/3	1/6	−1/2
[211] [211]	1/3	2/3	0

20c

[221][221]	[22]	
	[32]	[221]
[22][22]	3/4	1/4
[211][211]	1/4	−3/4

20d

[221][221]	[211]		
	[311]	[221]	[21³]
[22][211]	3/10	−1/2	1/5
[211][22]	−3/10	−1/2	−1/5
[211][211]	2/5	0	−3/5

20e

[221][221]	[1⁴]
	[21⁴]
[22][22]	−1

21a

[221][21³]	[4]
	[41]
[211][211]	1

21b

[221][21³]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[22][211]	−8/15	5/12	1/20
[211][211]	−2/15	−5/12	9/20
[211][1⁴]	−1/3	−1/6	−1/2

21c

[221][21³]	[22]	
	[32]	[221]
[22][1⁴]	3/8	5/8
[211][211]	5/8	−3/8

21d

[221][21³]	[211]	
	[311]	[221]
[22][211]	−3/4	1/4
[211][211]	1/4	3/4

22a [21³]×[21³]

[21³][21³]	[4]	
	[5]	[41]
[211][211]	3/4	1/4
[1⁴][1⁴]	1/4	−3/4

22b

[21³][21³]	[31]		
	[41]	[32]	[311]
[211][211]	5/6	1/6	0
[211][1⁴]	−1/12	5/12	1/2
[1⁴][211]	−1/12	5/12	−1/2

22c

[21³][21³]	[22]
	[32]
[211][211]	1

22d

[21³][21³]	[211]
	[311]
[211][211]	1

5. $S_{n_1+n_2}\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ *ISF*

用以下记号代表 9 个群所对应的 9 个 *IR*

$$\begin{pmatrix}\sigma' & \mu' & \nu' \\ \sigma'' & \mu'' & \nu'' \\ \sigma & \mu & \nu\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}S_{n_1}(x) & S_{n_1}(\xi) & S_{n_1}(q) \\ S_{n_2}(x) & S_{n_2}(\xi) & S_{n_2}(q) \\ S_n(x) & S_n(\xi) & S_n(q)\end{pmatrix} \tag{4-197}$$

如 μ'' 为 $S_{n_2}(\xi)$ 的 *IR* 等. $n=n_1+n_2$. 将 $S_n(x)\supset S_{n_1}(x)\otimes S_{n_2}(x)$, $S_n(\xi)\supset S_{n_1}(\xi)\otimes S_{n_2}(\xi)$ 和 $S_n(q)\supset S_{n_1}(q)\otimes S_{n_2}(q)$ 分类基分别表为:

$$\left|\begin{matrix}[\sigma] \\ \theta[\sigma']m_1'[\sigma'']m_1''\end{matrix}\right\rangle,\quad \left|\begin{matrix}[\mu] \\ \varphi[\mu']m_2'[\mu'']m_2''\end{matrix}\right\rangle,\quad \left|\begin{matrix}[\nu] \\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle. \tag{4-198}$$

$$\theta=1,\ 2,\ \cdots\{\sigma'\sigma''\sigma\}\quad \varphi=1,\ 2,\ \cdots\{\mu'\mu''\mu\},\quad \tau=1,\ 2,\ \cdots\{\nu'\nu''\nu\}$$

将前两者线性组合成第三者可分两步走，首先用 S_{n_1} 和 S_{n_2} 群 CG 系数将前两者组合成 $S_{n_1}(q)$ 和 $S_{n_2}(q)$ 的 IR 基 $[\nu']m'$ 和 $[\nu'']m''$

$$\left|(\sigma'\sigma'')_\theta(\mu'\mu'')_\varphi\beta'\beta''\right\rangle=\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma'][\sigma'']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu'][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']_{\beta'}[\nu'']_{\beta''}}_{m'm''}$$

$$=\sum_{m_1'm_2'm_1''m_2''}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma']m_1'[\sigma'']m_1''\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu']m_2'[\mu'']m_2''\end{matrix}\right\rangle,$$

$$\beta'=1,\ 2,\ \cdots(\sigma'\mu'\nu'),\qquad \beta''=1,\ 2,\ \cdots(\sigma''\mu''\nu'') \tag{4-199}$$

然后，再用 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ ISF 将上式组合成 $S_n(q)\supset S_{n_1}(q)\otimes S_{n_2}(q)$ 不可约基：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]_\beta\\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\sigma'\sigma''\theta\beta'\\ \mu'\mu''\varphi\beta''}}C^{[\nu]_\beta,\tau[\nu']_{\beta'}[\nu'']_{\beta''}}_{[\sigma]\theta\sigma'\sigma'',[\mu]\varphi\mu'\mu''}\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma'][\sigma'']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu'][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']_{\beta'}[\nu'']_{\beta''}}_{m'm''}$$

$$\beta=1,\ 2,\ \cdots(\sigma\mu\nu) \tag{4-200}$$

上式的逆展开为：

$$\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma'][\sigma'']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu'][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']_{\beta'}[\nu'']_{\beta''}}_{m'm''}=\sum_{\nu\beta\tau}C^{[\nu]_\beta,\tau[\nu']_{\beta'}[\nu'']_{\beta''}}_{[\sigma]\theta\sigma'\sigma'',[\mu]\varphi\mu'\mu''}\left|\begin{matrix}[\nu]_\beta\\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle. \tag{4-201}$$

特例：

当 x 空间的不可约基为全对称基 $|[n]\rangle$ 时，它也必定是 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 分类基 $\left|\begin{matrix}[n]\\ [n_1][n_2]\end{matrix}\right\rangle$.

在此情形下显然有：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle^q=\delta_{\nu\mu}\delta_{\nu'\mu'}\delta_{\nu''\mu''}\delta_{\tau\varphi}\delta_{m'm_2'}\delta_{m''m_2''}\left|\begin{matrix}[n]\\ [n_1][n_2]\end{matrix}\right\rangle^x\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu']m_2'[\mu'']m_2''\end{matrix}\right\rangle^\xi. \tag{4-202}$$

与(4-200)式比较可知

$$C^{[\nu],\tau[\nu'][\nu'']}_{[n][n_1][n_2],[\mu]\varphi[\mu'][\mu'']}=\delta_{\nu\mu}\delta_{\nu'\mu'}\delta_{\nu''\mu''}\delta_{\tau\varphi}. \tag{4-203}$$

类似地可得到：

$$C^{[\nu],\tau[\nu'][\nu'']}_{[1^n][1^{n_1}][1^{n_2}],[\mu]\varphi\mu'\mu''}=\delta_{\nu\tilde{\mu}}\delta_{\nu'\tilde{\mu}'}\delta_{\nu''\tilde{\mu}''}\delta_{\tau\varphi}. \tag{4-204}$$

§7·16 将证明 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ ISF 就是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基分出 n_2 个粒子的母分系数，并给出其计算公式.

§4.20 附录 用本征函数法推导 Yamanouchi 矩阵元的公式

本节我们用 $|\lambda\rangle=|\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2\rangle$ 代表一个 Yamanouchi 基. 根据

$$[(n-1,\ n),\ C(f)]=0,\qquad f=n,\ n-2,\ \cdots 2, \tag{4-205a}$$

$$[(n-1,\ n),\ C(n-1)]\neq 0, \tag{4-205b}$$

可知，对换 $(n-1,\ n)$ 只有在 $|\lambda_n\lambda_{n-1}'\lambda_{n-2}\cdots\lambda_2\rangle$ 和 $|\lambda_n\lambda_{n-1}\lambda_{n-2}\cdots\lambda_2\rangle$ 之间才有非零矩阵元，即

$$\langle\lambda_n'\lambda_{n-1}'\cdots\lambda_2'|(n-1,\ n)|\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2\rangle=\text{const}\,\delta_{\lambda_n'\lambda_n}\delta_{\lambda_{n-2}'\lambda_{n-2}}\cdots\delta_{\lambda_2'\lambda_2}. \tag{4-206}$$

容易得到以下等式

$$C(n)=C(n-1)+\sum_{i=1}^{n-1}(i,\ n), \tag{4-207a}$$

$$\sum_{i=1}^{n-2}(i,\ n-1)=C(n-1)+C(n-2), \tag{4-207b}$$

$$C(n)=C(n-1)+(n-1,\ n)\sum_{i=1}^{n-2}(i,\ n-1)(n-1,\ n)+(n-1,\ n). \tag{4-207c}$$

利用(4-207b)式和(4-205a)式，(4-207c)式变成

$$C(n)=C(n-1)-C(n-2)+(n-1,\ n)C(n-1)(n-1,\ n)+(n-1,\ n). \tag{4-208a}$$

上式可写成

$$[C(n-1),\ (n-1,\ n)]_+=(C(n)+C(n-2))(n-1,\ n)-1, \tag{4-208b}$$

这里$[A,\ B]_+=AB+BA$.

将(4-208b)插入两个 Yamanouchi 基矢 $|\lambda'\rangle$和 $|\lambda\rangle$中间，并利用(4-28b)和(4-206)我们得到

$$\langle\lambda_n'\lambda_{n-1}'\cdots\lambda_2'|(n-1,\ n)|\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2\rangle=\delta_{\lambda_n'\lambda_n}\delta_{\lambda_{n-2}'\lambda_{n-2}}\cdots\delta_{\lambda_2'\lambda_2}\mu^{-1}$$

$$\mu=\lambda_n-\lambda_{n-1}'-\lambda_{n-1}+\lambda_{n-2}. \tag{4-209}$$

由上式得到$(n-1,\ n)$的对角矩阵元

$$\langle\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2|(n-1,\ n)|\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2\rangle=\sigma^{-1} \tag{4-210a}$$

$$\sigma=\lambda_n-2\lambda_{n-1}+\lambda_{n-2} \tag{4-210b}$$

和非对角矩阵元

$$\langle\lambda_n\lambda_{n-1}'\cdots\lambda_2|(n-1,\ n)|\lambda_n\lambda_{n-1}\cdots\lambda_2\rangle=\begin{cases}0, & \text{当}\quad \mu\neq 0\\ b, & \qquad \mu=0,\end{cases} \tag{4-211}$$

这里的 b 是待定系数．在决定 b 之前，我们首先看一下 $(n-1,\ n)$的非对角矩阵元不为零的条件．令 $Y_{\lambda'}$ 和 Y_λ 分别为对应于基矢 $|\lambda_n\lambda_{n-1}'\lambda_{n-2}\cdots\lambda_2\rangle$和 $|\lambda_n\lambda_{n-1}\lambda_{n-2}\cdots\lambda_2\rangle$的杨盘．由于它们的差别仅在第二个量子数 λ_{n-1}'，因此粒子 1, 2, $\cdots n$ 和 1, 2, $\cdots$, $n-2$ 在 Y_λ 中所占据的杨图$[\nu]$和$[\nu'']$必定跟在 $Y_{\lambda'}$ 中所占据的相同．这等价于说，若 $n-1$ 和 n 处于 Y_λ 中的同一行或列，则 $Y_{\lambda'}=Y_\lambda$．换句话说，如果 $|\lambda\rangle$和 $|\lambda'\rangle$不等而其中的任一个相对于 $n-1$, n 是对称或反对称的话，则$\langle\lambda'|(n-1,\ n)|\lambda\rangle=0$．另一方面，如果在 Y_λ 中 $n-1$ 和 n 不位于同一行或列，则前述条件意味着 $Y_{\lambda'}$ 和 Y_λ 的差别仅在于交换 $n-1$ 和 n 的位置．

总而言之，只有当 $n-1$ 和 n 既不在同一行也不在同一列并且当 $Y_{\lambda'}=(n-1,\ n)Y_\lambda$ 时，非对角元$\langle\lambda'|(n-1,\ n)|\lambda\rangle$才不为零．

根据$(n-1,\ n)^2=1$ 以及上述讨论，立即得到

$$\langle\lambda|(n-1,\ n)|\lambda\rangle^2+\langle\lambda|(n-1,\ n)|\lambda'\rangle\langle\lambda'|(n-1,\ n)|\lambda\rangle=1. \tag{4-212}$$

因此系数 b 由下式决定

$$|b|^2=1-\frac{1}{\sigma^2}. \tag{4-213a}$$

采用 Yamanouchi 位相约定有

$$\langle\lambda'|(n-1,\ n)|\lambda\rangle=\frac{\sqrt{\sigma^2-1}}{|\sigma|}. \tag{4-213b}$$

最后我们证明(4-210b)式定义的 σ 就是杨盘 Y_λ 中，从 $n-1$ 到 n 的轴距．

假定 n 和 $n-1$ 分别位于 Y_λ 中的第 l 和 l' 行．因此 n 和 $n-1$ 分别处于 $Y_{\lambda'}$ 中的第 l' 和 l 行．由(4-210b)和(4-3a)得

$$\sigma=\frac{1}{2}[(f_l+f_{l'})-2(f_{l-1}+f_{l'})+(f_{l-1}+f_{l'-1})]$$

$$=\frac{1}{2}[(f_l-f_{l-1})-(f_{l'}-f_{l'-1})], \tag{4-214}$$

这里

$$f_l=\nu_l(\nu_l-2l).$$

于是

$$\sigma=(\nu_l-l)-(\nu_{l'}-l'). \tag{4-215}$$

上式就是(4-16)式，因为根据定义可知

$$\nu_l=c_n,\ \nu_{l'}=c_{n-1},\ l=r_n,\ l'=r_{n-1}.$$

第五章　李　群

李群和李代数的应用十分广泛，其内容相当丰富．我们这里只能涉及其中很小的一部分．主要讨论如何求线性变换群的无穷小算符及如何把有限群表示新途径推广到李群中去，使读者对有限群及李群有一个统一的认识．李群中某些非常重要的概念，如根和权，这里都未涉及．读者可参考 Racah, Gilmore 或 Wybourne 的书．

§5.1　张　量

本章采用暗和约定，即对重复指标求和．本节内容可参考 Yilmaz (1965)．

1．向量(一级张量)

以后用上指标代表逆变，下指标代表共变．§2 中(2·6)式和(2·7)式重新表述如下．

$$\boldsymbol{x} = x^\mu \boldsymbol{u}_\mu, \tag{5-1}$$

$$\boldsymbol{u}'_\mu = B^\nu_\mu \boldsymbol{u}_\nu, \quad x'^\mu = A^\mu_\nu x^\nu. \tag{5-2a, b}$$

注意，写成矩阵元形式时，$A^\mu_\nu(B^\nu_\mu)$的上(下)指标为行指标

$$A^\mu_\nu = A_{\mu\nu}, \quad B^\nu_\mu = B_{\mu\nu}, \quad B = \widetilde{A}^{-1}. \tag{5-3}$$

对于非线性变换，则满足以下变换关系的坐标定义为逆变坐标

$$dx'^\mu = A^\mu_\nu dx^\nu, \quad A^\mu_\nu = \frac{\partial x'^\mu}{\partial x^\nu}. \tag{5-4a, b}$$

除了逆变坐标外，我们也可引入共变坐标 x_μ，它满足变换关系

$$dx'_\mu = B^\nu_\mu dx_\nu. \tag{5-5}$$

由(5·5)式及(5·3)式得

$$B^\nu_\mu = \frac{\partial x'_\mu}{\partial x_\nu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\ ^{1)}. \tag{5-6}$$

变换性质和(5–4a)及(5–5)式相同的量分别定义为逆变向量和共变向量：

$$V'^\mu = A^\mu_\nu V^\nu, \quad V'_\mu = B^\nu_\mu V_\nu. \tag{5-7}$$

容易证明一个标量 Φ 对逆(共)变指标的微商是一个共(逆)变向量．如

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x'^\mu} = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}\frac{\partial \Phi}{\partial x^\nu} = B^\nu_\mu \frac{\partial \Phi}{\partial x^\nu}. \tag{5-8}$$

因此微分算符 $\partial_\mu = \dfrac{\partial}{\partial x^\mu}$，$\partial^\mu = \dfrac{\partial}{\partial x_\mu}$ 可分别视为共、逆变向量．

2．二级以上张量

满足以下变换性质

$$T'^{\mu\nu} = A^\mu_\rho A^\nu_\sigma T^{\rho\sigma}, \quad T'_{\mu\nu} = B^\rho_\mu B^\sigma_\nu T_{\rho\sigma},$$

$$T'^{\ \mu}_{\nu} = A^\mu_\rho B^\sigma_\nu T^\rho_\sigma, \tag{5-9a}$$

---

1) 简单证明如下：$\boldsymbol{u}_\mu dx^\mu = \boldsymbol{u}'_\mu dx'^\mu = \boldsymbol{u}_\nu B^\nu_\mu dx'^\mu = \boldsymbol{u}_\nu dx^\nu$，即 $dx^\nu = B^\nu_\mu dx'^\mu$，于是 $B^\nu_\mu = \dfrac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu}$．

的量 $T^{\mu\nu}$, $T_{\mu\nu}$ 和 T^{μ}_{ν} 分别称为二级逆变，共变和混合张量．以上定义可推广至高阶张量．例如对三级混合张量有

$$T'^{\ \ \tau}_{\rho\sigma}=B^{\mu}_{\rho}B^{\nu}_{\sigma}A^{\tau}_{\lambda}T^{\lambda}_{\mu\nu}. \tag{5-9b}$$

3．度规张量

(2-16) 式定义的度规张量是一个厄米矩阵．在此度规下空间 L 中两个矢量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的标量积为

$$(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})=x^{\mu *}g_{\mu\nu}x^{\nu}. \tag{5-10}$$

这种度规称为 sesquilinear 度规(Gilmore 第 2 章)．另一种度规称为双线性(bilinear)度规，在此度规下，标量积定义为

$$(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})=x^{\mu}g_{\mu\nu}x^{\nu}. \tag{5-11a}$$

其度规张量

$$g_{\mu\nu}=(\boldsymbol{u}_{\mu},\ \boldsymbol{u}_{\nu}). \tag{5-11b}$$

无论对实空间或复空间都是二级共变张量．显然 $g_{\mu\nu}$ 之矩阵$(g^{-1})_{\nu\sigma}$ 为二级逆变张量．令

$$g^{\sigma\nu}=(g^{-1})_{\nu\sigma}=M^{\sigma\nu}/\det(g_{\mu\nu}). \tag{5-12a}$$

$$g_{\mu\nu}g^{\sigma\nu}=\delta^{\sigma}_{\mu}. \tag{5-12b}$$

这里 $M^{\sigma\nu}$ 为矩阵$(g_{\mu\nu})$中 $g^{\sigma\nu}$ 元素的代数余因子．

利用定义 $g^{\sigma\nu}=(g^{-1})_{\nu\sigma}$，(2-111)式可改写成

$$|\overline{\varphi}_{\sigma}\rangle=|\varphi^{\sigma}\rangle=g^{\sigma\nu}|\varphi_{\nu}\rangle. \tag{5-12c}$$

因此 § 2·1 对非正交基矢 $|\varphi_{\sigma}\rangle$ 引进的 dual basis $|\overline{\varphi}_{\sigma}\rangle$ 其实就是逆变基矢．

注意，(5-10)式和(5-11a)之间的差别．对实空间，这差别消失．

4．度量空间(metric space)

若一空间中，逆变和共变向量不是独立的，而是可以通过度规张量互相转换的，则称此空间为度量空间，即在度量空间有

$$V_{\mu}=g_{\mu\nu}V^{\nu},\quad V^{\mu}=g^{\mu\nu}V_{\nu}. \tag{5-13}$$

由此看到度规张量可使指标上升或下降．这一性质可推广到高阶张量．如

$$T^{\nu}_{\mu}=g_{\rho\mu}T^{\rho\nu}.$$

由(5-13)式，标量积(5-11a)可写成

$$(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{y})=x^{\mu}y_{\mu}=x_{\mu}y^{\mu}. \tag{5-11c}$$

上式中对上、下指标 μ 的求和称为收缩．一对上、下指标的收缩，将使张量降低二级，例如 $U_{\nu\rho}=T^{\mu}_{\mu\nu\rho}(\equiv\sum\limits_{\mu}T^{\mu}_{\mu\nu\rho})$ 为二级共变张量．对正交归一基底，$g_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}$，由(5-13)式可知 $V^{\mu}=V_{\mu}$ 共变逆变相同．我们均在度量空间中进行讨论．

例　二维直角坐标$(x,\ y)$到极坐标的变换．

对直角坐标$(x,\ y)$，度规张量

$$g=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{5-14}$$

共逆变合一，$dx^{1}=dx_{1}=dx$，$dx^{2}=dx_{2}=dy$．极坐标中我们把 r、θ 看作为逆变坐标，$dx'^{1}=dr$，$dx'^{2}=d\theta$．由 $x=r\cos\theta$，$y=r\sin\theta$ 得

$$\begin{pmatrix}dx\\ dy\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -r\sin\theta\\ \sin\theta & r\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}dr\\ d\theta\end{pmatrix},\quad A^{-1}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -r\sin\theta\\ \sin\theta & r\cos\theta\end{pmatrix}. \tag{5-15}$$

由 A^{-1} 可求得矩阵

$$B=\widetilde{A}^{-1}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -r\sin\theta & r\cos\theta\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\dfrac{\sin\theta}{r} & \dfrac{\cos\theta}{r}\end{pmatrix}. \tag{5-16}$$

由(5-9a)、(5-14)及上式,得到极坐标下的二级共变度规张量,

$$(g'_{\mu\nu})=g'=Bg\widetilde{B}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & r^2\end{pmatrix}. \tag{5-17}$$

由(5-4a)式、(5-5)式和(5-16)式得

$$\begin{pmatrix}dx'^1\\ dx'^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}dr\\ d\theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\dfrac{\sin\theta}{r} & \dfrac{\cos\theta}{r}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}dx\\ dy\end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix}dx'_1\\ dx'_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -r\sin\theta & r\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}dx\\ dy\end{pmatrix}. \tag{5-18}$$

由(5-17)、(5-18)式可验证

$$\begin{pmatrix}dx'_1\\ dx'_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & r^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}dx'^1\\ dx'^2\end{pmatrix}.$$

不变量 ds^2 为

$$ds^2=dx^\mu g_{\mu\nu}dx^\nu=dx^2+dy^2=dx'^\mu g'_{\mu\nu}dx'^\nu=d^2r+r^2d^2\theta.$$

§5.2 李群的定义及例子

李群是一种特殊的连续群,它的元素 R 可用 r 个实参数 $a^1, \cdots, a^r$ 表示出来.

$$R(a)\equiv R(a^1, \cdots, a^r). \tag{5-19}$$

参数 a^ρ 可以在有限范围内连续变化,也可以在无限范围内连续变化. r 个参数构成的空间称为群参数空间. 如 $R(a)$ 满足以下五个条件,则称群 G 为 r 阶(order)李群(注意这里阶的定义和有限群不同).

(1) 存在幺元素 $R(a_0)$

$$R(a_0)R(a)=R(a)R(a_0)=R(a),\ 对所有\ R(a)\in G. \tag{5-20}$$

通常把幺元素对应的参数 a_0 取作 0, 即 $R(a_0)=R(0)$.

(2) 存在逆元素,对任意 a, 可以找到 $\bar{a}$, 使得

$$R(\bar{a})R(a)=R(a)R(\bar{a})=R(0),\ 即\ R(\bar{a})=R^{-1}(a). \tag{5-21}$$

(3) 封闭性: 对于给定的 a, b 总可以在参数集中找到 c, 使

$$R(c)=R(b)R(a). \tag{5-22}$$

参数 c 为实参数 a, b 的实函数.

$$c=\varphi(a, b). \tag{5-23}$$

上式称为群参数结合律.

(4) 乘法满足结合律

$$\begin{gathered}R(a)[R(b)R(c)]=[R(a)R(b)]R(c),\\ \varphi(\varphi(c, b), a)=\varphi(c, \varphi(b, a)).\end{gathered} \tag{5-24}$$

(5) (5-23)式中 c 为 a, b 的解析函数, (5-21)式中 $\bar{a}$ 为 a 的解析函数.

例 1 二维空间实线性变换群 $GL(2, R)$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad R(a) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}. \tag{5-25}$$

2×2 非奇异矩阵 $R(a)$ 的全体，按矩阵乘法构成一个群称为二维实线性变换群．它的元素可用四个实参数 $a^1=a_{11}$, $a^2=a_{12}$, $a^3=a_{21}$, $a^4=a_{22}$ 标志，阶数为四．如果限制 $\det(R)=1$，则称为特殊(special)二维实线性变换群，或幺模二维实线性变换群 $SL(2, R)$．

例 2 二维空间复线性变换群 $GL(2, c)$

若(5-25)式中 a_{kl} 为复数，则 $R(a)$ 构成二维空间复线性变换群．令 $a_{kl}=b_{kl}+ic_{kl}$, b_{kl}, c_{kl} 为实数，它的元素可用八个实参数标志，$a^1=b_{11}$, …, $a^4=b_{22}$, $a^5=c_{11}$, …, $a^8=c_{22}$，阶数为八．

例 3 SU_2 群

若(5-25)式中

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \tag{5-26a}$$

为一酉矩阵

$$U^\dagger U = 1, \tag{5-27}$$

则(5-26a)式的全体构成 U_2 群．如果进一步限制

$$\det(U) = 1 \tag{5-28}$$

则它们构成 SU_2 群．由(5-26a)式、(5-28)式得到

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}. \tag{5-26b}$$

由 $U^\dagger = U^{-1}$ 及(5-26a)式、(5-28)式得

$$d = a^*, \quad c = -b^*, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1.$$

因此 SU_2 群元的最一般形式为

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} e^{i\xi}\cos\eta & -e^{-i\zeta}\sin\eta \\ e^{i\zeta}\sin\eta & e^{i\xi}\cos\eta \end{pmatrix}. \tag{5-29}$$

它包含三个实参数 ξ、η、ζ，所以它的阶数 $r=3$．

例 4 二维转动群

将 xy 平面上一点 P(坐标为 x, y)绕 z 轴转过 φ 角到达 P'(坐标为 x', y')．由图 5.2 得

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r\cos(\varphi+\theta) \\ r\sin(\varphi+\theta) \end{pmatrix} = R_z(\varphi) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \tag{5-30a}$$

$$R_z(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}. \tag{5-30b}$$

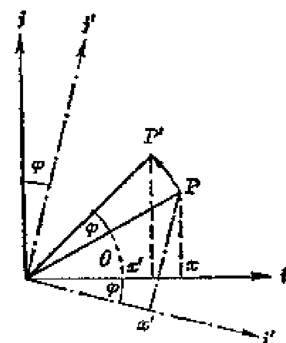


图 5.2

$R_z(\varphi)$ ($\varphi=0-2\pi$) 构成二维转动群 R_2，它只依赖于一个参数 φ．(5-30b)式是一正交矩阵，满足

$$R\tilde{R} = I, \quad \tilde{R}^{-1} = R. \tag{5-31}$$

所以 R_2 群又称为二维正交群 SO_2．注意(5-30b)式和(2-60b)式

一致，后者是由 $\varphi_1=x$, $\varphi_2=y$ 荷载的转动群 R_2 的二维表示.

比较(5-27)式和(5-31)式可知，若限制幺正变换为实变换，则酉群就退化为正交群. 例如，令(5-29)式中 $\xi=\zeta=0$, $\eta=\varphi$, (5-29)式就退化为(5-31)式.

注意 由图 5·2 看到，如果 P 点不动，将坐标轴绕 z 轴转 $-\varphi$ 角，则同一点 P 在新坐标轴 $\boldsymbol{i}'$, $\boldsymbol{j}'$ 上的坐标 x', y' 和老坐标 x, y 之间的关系仍满足(5-30)式.

例 5 三维转动群 R_3

类似于(5-31)式，将 P 点绕 x, y, z 轴分别转 α, β, γ 角的变换矩阵为

$$R_x(\alpha)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha\\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix},\quad R_y(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\beta & 0 & \sin\beta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta\end{pmatrix},$$

$$R_z(\gamma)=\begin{pmatrix}\cos\gamma & -\sin\gamma & 0\\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{5-32}$$

将 P 点先绕 z 轴转 γ 角，后绕 y 轴转 β 角，再绕 z 轴转 α 角(α, β, γ 为欧勒角，定义见 Rose 书)而到达 P' 点，P' 和 P 点坐标之间的关系为：

$$\begin{pmatrix}x'\\ y'\\ z'\end{pmatrix}=\mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}, \tag{5-33}$$

$$\mathscr{D}(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)^{1)}$$

$$=\begin{pmatrix}\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma-\sin\alpha\sin\gamma, & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma-\sin\alpha\cos\gamma, & \cos\alpha\sin\beta\\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma+\cos\alpha\sin\gamma, & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma+\cos\alpha\cos\gamma, & \sin\alpha\sin\beta\\ -\sin\beta\cos\gamma & \sin\beta\sin\gamma & \cos\beta\end{pmatrix}. \tag{5-34}$$

这里 $\mathscr{D}$ 仍为正交矩阵，$\mathscr{D}^{-1}=\widetilde{\mathscr{D}}$. 因此 R_3 群又称为幺模三维正交群 SO_3.

现在考虑一个新坐标系 $\bar{x}\bar{y}\bar{z}$，它是将老坐标系先绕 z 轴转 γ，后绕 y 轴转 β，最后绕 z 轴转 α 角而得到的(图见 Bohr. I p. 76)即新老坐标系之间的夹角为欧勒角 $\alpha\beta\gamma$. 由例 4 的讨论可知，同一点 P 在新老坐标系上的坐标($\bar{x}\bar{y}\bar{z}$)和(xyz)之间的变换关系为

$$\begin{pmatrix}\bar{x}\\ \bar{y}\\ \bar{z}\end{pmatrix}=\mathscr{D}^{-1}(\alpha\beta\gamma)\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}=\widetilde{\mathscr{D}}(\alpha\beta\gamma)\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}. \tag{5-35}$$

§5.3 李 代 数

紧致李群(Compact Li Group)：如李群的参数为有界，则称为紧致李群.

李群的无穷小生成元：

苏菲斯·李证明了研究李群的性质只要研究幺元素邻域的性质就够了，为此将群元 $R(a)$ 作展开

1) 注意 $R(\alpha\beta\gamma)\neq R_x(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$.

$$R(a)=R(0)+a^{\rho}X_{\rho}+\cdots. \tag{5-36}$$

这里

$$X_{\rho}=\left(\frac{\partial R(a)}{\partial a^{\rho}}\right)_{a=0}, \tag{5-37}$$

称为李群的无穷小生成元.对 r 阶李群,有 r 个线性独立的无穷小生成元. 研究幺元素邻域只需保留(5-36)式中 a 的一次项就够了,即

$$R(a)=1+a^{\rho}X_{\rho}. \tag{5-38}$$

其逆元素为

$$R^{-1}(a)=1-a^{\rho}X_{\rho}. \tag{5-39}$$

若有两个无穷小元素

$$R(a)=1+\epsilon X_{\rho},\quad R(b)=1+\epsilon X_{\sigma}. \tag{5-40}$$

按李群定义有:

$$\begin{aligned}&R(a)R(b)=R(c)=1+C^{\tau}X_{\tau},\\&R(b)R(a)=R(c')=1+C'^{\tau}X_{\tau}\\\therefore\quad&[R(a),\ R(b)]=\epsilon^{2}C^{\tau}_{\rho\sigma}X_{\tau},\\&C^{\tau}_{\rho\sigma}=(C^{\tau}-C'^{\tau})/\epsilon^{2}.\end{aligned} \tag{5-41}$$

另一方面由(5-40)式可得

$$[R(a),\ R(b)]=\epsilon^{2}[X_{\rho},\ X_{\sigma}]. \tag{5-42}$$

比较以上两式得到一个重要关系式

$$[X_{\rho},\ X_{\sigma}]=C^{\tau}_{\rho\sigma}X_{\tau}, \tag{5-43}$$

即两个无穷小生成元的对易式仍可表示为 r 个无穷小生成元的线性组合, $C^{\tau}_{\rho\sigma}$ 称为李群的结构常数,它有两个重要性质:

(1) 对下指标反对称

$$C^{\tau}_{\rho\sigma}=-C^{\tau}_{\sigma\rho}. \tag{5-44}$$

(2) 根据 Jacobi 恒等式

$$[[X_{\rho},\ X_{\sigma}],\ X_{\tau}]+[[X_{\sigma},\ X_{\tau}],\ X_{\rho}]+[[X_{\tau},\ X_{\rho}],\ X_{\sigma}]=0 \tag{5-45a}$$

得:

$$C^{\mu}_{\rho\sigma}C^{\nu}_{\mu\tau}+C^{\mu}_{\sigma\tau}C^{\nu}_{\mu\rho}+C^{\mu}_{\tau\rho}C^{\nu}_{\mu\sigma}=0. \tag{5-45b}$$

r 个无穷小生成元 $\{X_{\rho}\}$ 张成一个实的 r 维向量空间,该空间内任一向量可表为 $a^{\rho}X_{\rho}$. 在该空间内定义两个基向量的积为(5-43)式. 于是 $\{X_{\rho}\}$ 相对于线性组合和(5-43)式所定义的积是封闭的,即构成一个代数. 称为该李群所对应的李代数[1].

索非斯·李关于连续群理论的基本观念是不考虑整个群,而只考虑恒等变换附近的无限小变换. 把研究无穷多个元素的李群的表示问题归结为研究有限个(r 个)无穷小生成元的表示问题也即李代数的表示问题. 找到了李代数的不可约表示也就找到了李群的不可约表示,因此李代数的研究在李群理论中占有非常重要的地位. 对于一给定的李群,我们总首先找出其对应的李代数. 在物理上常常出现这样的情况,李代数很自然地表现出来,而对应的李群则没有简单的物理解释. 在这种场合,我们就只和李代数打交道,而根本不提与之相联系的李群.

1) 如果 a^{ρ} 为实数,称为实的李代数,否则称为复的李代数.

r 个无穷小生成元 $\{X_\rho\}$ 构成 r 维空间的共变基矢，在此空间内任一矢量 X 可表为

$$X = a^\rho X_\rho. \tag{5-46}$$

$\{a^\rho\}$ 可看作抽象矢量 X 的坐标. 由(5-2)式知基底和坐标的变换关系分别为

$$X'_\rho = B_\rho^\sigma X_\sigma,\quad a'^\rho = A_\sigma^\rho a^\sigma,\quad A = \tilde{B}^{-1}. \tag{5-47a, b, c}$$

在新基矢 $\{X'_\rho\}$ 下，结构常数为 $C'^{\tau}_{\rho\sigma}$，

$$[X'_\rho,\ X'_\sigma] = C'^{\tau}_{\rho\sigma} X'_\tau. \tag{5-48}$$

由(5-9b)式知，新老结构常数的关系为

$$C'^{\tau}_{\rho\sigma} = B_\rho^\mu B_\sigma^\nu A_\lambda^\tau C^\lambda_{\mu\nu}. \tag{5-49}$$

由此可知，同一个李群的李代数，可因参数变换而取形式上不同的结构常数，这一点在研究李代数的分类时应特别注意.

例 1 $GL(2, R)$群.

由(5-25)式和(5-37)式得到四个无穷小生成元

$$X_1 = e_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_2 = e_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$X_3 = e_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad X_4 = e_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5-50}$$

容易证明它们满足对易式

$$[e_{\alpha\beta},\ e_{\gamma\delta}] = \delta_{\beta\gamma} e_{\alpha\delta} - \delta_{\alpha\delta} e_{\gamma\beta}. \tag{5-51}$$

例 2 SO_2 群. 由(5-30b)式和(5-37)式得

$$X_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5-52}$$

例 3 SO_3 群. 由(5-34)和(5-37)式得

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},\quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\quad X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5-53a}$$

它们满足对易式

$$[X_1,\ X_2] = X_3,\ 1,\ 2,\ 3\ \text{轮换}. \tag{5-53b}$$

§5.4 有限变换

(5-38)式给出了无穷小变换的表达式，下面要找出有限变换的表达式.

先看单参数群 SO_2. 对应于(5-36)式和(5-37)式，现在有

$$R(\delta\varphi) = 1 + \delta\varphi X_\varphi,\quad X_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{5-54}$$

令无穷小角度 $\delta\varphi = \varphi/N$, N 为一个任意大数. 于是

$$R(\delta\varphi) \simeq \left(1 + \frac{\varphi}{N} X_\varphi\right).$$

将 $R(\delta\varphi)$ 作用 N 次，可得到有限转动

$$R(\varphi)\cong\left(1+\frac{\varphi}{N}X_\varphi\right)^N=\sum_{n=0}^{N}\binom{N}{n}\left(\frac{\varphi}{N}X_\varphi\right)^n$$

$$\xrightarrow[N\to\infty]{} 1+\varphi X_\varphi+\frac{\varphi^2}{2!}X_\varphi^2+\frac{\varphi^3}{3!}X_\varphi^3+\cdots \tag{5-55}$$

上式可写成指数形式

$$R(\varphi)=e^{\varphi X_\varphi}. \tag{5-56}$$

将(5-54)式代入到(5-55)式，$\boldsymbol{R}(\varphi)$就回到我们熟知的形式(5-30b)：

$$\boldsymbol{R}(\varphi)=\cos\varphi\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\sin\varphi\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\varphi&-\sin\varphi\\ \sin\varphi&\cos\varphi\end{pmatrix}.$$

这里略去不发生变化的 z 分量. 如果把它考虑进去，则(5-52)式的 $X_\varphi\to$(5-53a)式的 X_3，令 $X_3=-iJ_z$，就得到算符 J_z 在直角坐标中的表示矩阵为

$$J_z=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}.$$

它就是角动量的 z 分量. 于是 SO_2 群元可表为熟知的形式

$$R_z(\varphi)=e^{-i\varphi J_z}. \tag{5-57}$$

注意，SO_2 群元(5-30b)式与(5-57)式的联系和差别，前者是 SO_2 群的定义矩阵，也是 SO_2 群的一个二维表示，而 $e^{-i\varphi J_z}$ 是 SO_2 群的群元算符，它的作用不限于 SO_2 的二维定义空间.

同样，对 SO_3 群引入

$$X_1=-iJ_x,\quad X_2=-iJ_y,\quad X_3=-iJ_z. \tag{5-58a}$$

由(5-53a)式得

$$J_x=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\quad J_y=\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix},\quad J_z=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}. \tag{5-58b}$$

由(5-53b)得

$$[J_x,\ J_y]=iJ_z,\quad x,\ y,\ z\ \text{轮换}. \tag{5-59}$$

$J_{x,y,z}$ 为角动量 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量，(5-58b)式为它们在三维笛卡尔基上的矩阵表示.

对应于(5-32)式的转动算符为

$$\boldsymbol{R}_x(\alpha)=e^{-i\alpha J_x},\quad R_y(\beta)=e^{-i\beta J_y},\quad R_z(\gamma)=e^{-i\gamma J_z}. \tag{5-60}$$

绕空间轴 $\boldsymbol{n}$(方位角为 $\theta'\varphi'$)转过 φ 角的转动算符可表为

$$\boldsymbol{R}_n(\varphi)=e^{-i\varphi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}=\exp[-i\varphi(J_x\sin\theta'\cos\varphi'+J_y\sin\theta'\sin\varphi'+J_z\cos\theta')]. \tag{5-61}$$

这样一个转动可写成两个转动的乘积

$$\boldsymbol{R}_n(\varphi)=R(\varphi',\ \theta',\ 0)R(\varphi,\ -\theta',\ -\varphi'). \tag{5-62}$$

(这里等式右边 R 的宗量为欧勒角). (5-62)式右边对应以下三个相继的转动：先使 θ'，φ' 方向上的 $\boldsymbol{n}$ 转到与 z 轴重合的位置，然后绕 z 轴转 φ 角，最后将轴转回到 θ'，φ' 方向.

将(5-34)式代入(5-62)式就得到作用在三维空间 x, y, z 上时 $R_n(\varphi)$ 的矩阵形式.

无穷小变换(5-54)式到有限变换(5-55)式的过渡，可推广到一般情形

$$R(\delta a)\cong 1+a^\rho X_\rho,\quad R(a)=\exp(a^\rho X_\rho). \tag{5-63a, b}$$

注意，不是所有情形下，有限变换都能写成以上形式. 如有限变换能写成(5-63b)式形

式，则称$\{a^\rho\}$为正则参数．如(5-61)式中$a_x=\varphi\sin\theta'\cos\varphi'$，$a_y=\varphi\sin\theta'\sin\varphi'$，$a_z=\varphi\cos\theta'$为正则参数．如选欧勒角为$SO_3$群参数，由(5-34)，(5-60)得

$$R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)=e^{-i\alpha J_z}e^{-i\beta J_y}e^{-i\gamma J_z}. \tag{5-64}$$

注意由于J_y和J_z不对易，

$$R(\alpha,\ \beta,\ \gamma)\neq e^{-i(\alpha J_z+\beta J_y+\gamma J_z)}.$$

因此，(5-64)式不能写成(5-63b)形式，所以欧勒角$\alpha\beta\gamma$不是正则参数．

§5.5 李群和李代数的对应关系

李代数决定了李群在幺元素附近的局部性质，具有相同李代数的李群是局部同构的(locally isomorphic)，即在幺元素附近同构．李群和李代数的分类是一一对应的，这种对应关系是基于下面(5-65)式和(5-66)式二个关系式．令R_ρ，R_σ为两个无穷小元素，由(5-63b)式作展开，保留ϵ^2项得

$$R_\rho\cong1+\epsilon X_\rho+\frac{\epsilon^2}{2!}X_\rho^2,\quad R_\sigma\cong1+\epsilon X_\sigma+\frac{\epsilon^2}{2!}X_\sigma^2.$$

于是

$$[R_\rho,\ R_\sigma]=\epsilon^2[X_\rho,\ X_\sigma]=\epsilon^2C_{\rho\sigma}^\tau X_\tau. \tag{5-65}$$

$$R_\rho R_\sigma R_\rho^{-1}R_\sigma^{-1}=1+\epsilon^2[X_\rho,\ X_\sigma]=1+\epsilon^2C_{\rho\sigma}^\tau X_\tau. \tag{5-66}$$

根据以上两式，可得出以下一些对应关系：

李　群	李　代　数
1a．阿贝尔群 $[R_\rho,\ R_\sigma]=0,\qquad$(5-67a) $\rho,\ \sigma=1,\ 2,\ \cdots,\ r.$	1b．阿贝尔李代数 $[X_\rho,\ X_\sigma]=0,\qquad$(5-67b) $\rho,\ \sigma=1,\ 2,\ \cdots,\ r.$
2a．李群G的子群G_s 若X_i，X_j，…，X_k为G的子群G_s的生成元，令 $R_i=1+\epsilon X_i,\ R_j=1+\epsilon X_j.$ 于是 $R_iR_j\in G_s\qquad$(5-68a)	2b．李代数A的子代数A_s 由(5-68a)和对易式$[R_i,\ R_j]$仍属于G_s，再由(5-65)式，知X_i，X_j，…，X_k构成一个代数A_s，即 $[X_i,\ X_j]\in A_s.\qquad$(5-68b) 代数$A_s$称为$A$的子代数
3a．不变子群 若R_i，R_j，…，R_k构成一不变子群G_s，由(1-28)式知 $R_\rho R_iR_\rho^{-1}\in G_s,\ R_i\in G_s,\ \rho=1,\ 2,\ \cdots r.$ 于是 $R_\rho R_iR_\rho^{-1}R_i^{-1}\in G_s.\qquad$(5-69a)	3b．不变子代数 由(5-69a)和(5-66)式知 $[X_i,\ X_\rho]\in A_s,\qquad$(5-69b) $i=i,\ j,\ \cdots,\ k;\ \rho=1,\ 2,\ \cdots,\ r.$ X_i，X_j，…，X_k构成的代数A_s称为A的不变子代数．
4a．单纯李群 不包含不变子群的李群．	4b．单纯李代数 不包含不变子代数的李代数．
5a．半纯李群 不包含阿贝尔不变子群的李群．	5b．半纯李代数 不包含阿贝尔不变子代数的李代数．

李　　群	李　代　数
6a．可以证明(Weyl)一个半纯群为一组单纯群的直接乘积 $G=G_1\otimes G_2\otimes\cdots\otimes G_n$.　(5-70a) G_i 为单纯群，属于不同子群的元素互相对易．	6b．一个半纯李代数 A 为一组不变子代数的直接和 $A=A_1\oplus A_2\oplus\cdots\oplus A_n$.　(5-70b) 属于不同子代数的元素互相对易，且 A_i 和 A_j 不相交．
7a．紧致李群 参数有界的李群称为紧致李群．	7b．紧致李代数 与紧致李群相联系的代数称为紧致李代数．

区分半纯群和非半纯群是重要的．从表示角度来看，后者是非常麻烦的(见§5.12)，幸好物理应用上多数情况只需用半纯群．以下我们主要考虑半纯群(关于半纯群的判据见§5.12)．

秩：半纯李代数中，线性独立的互相对易的无穷小生成元的最大个数称为李代数的秩(也就是对应的李群的秩)，记为 l.

显然任何李群，至少是一秩的．

例1　SO_2 群只有一个无穷小生成元 J_z，它当然和自己对易．所以 SO_2 群为阿贝尔群，秩 $l=1$.

例2　SO_3 群有三个无穷小生成元 J_x，J_y，J_z，满足对易式(5-59)．J_x，J_y，J_z 都只和自身对易，所以 SO_3 是一秩非阿贝尔群．

它们都是单纯群．

§5.6　线性变换群(经典群)

§5.2 和 §5.3 给出了李群和李代数的一般定义，§5.2 举了几个简单的例子，以下我们将这些例子推广到一般的线性变换群．线性变换群又称经典群，是最简单的一种李群，也是物理上用得最多的一种李群．

假定 $R(a)=R(a^1a^2\cdots a^r)$ 为 n 维空间的线性变换

$$x\xrightarrow{R(a)}x'=R(a)x. \tag{5-71a}$$

写成分量形式为

$$x'^\alpha=R_{\alpha\beta}(a)x^\beta,\quad \alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n. \tag{5-71b}$$

这里 x 也可以是实数，也可以是复数，$n\times n$ 矩阵 $R(a)$ 的全体构成 n 维空间的一个线性变换群，它又可分为

1．$GL(n,\ c)$——一般的复线性变换群

矩阵元 $R_{\alpha\beta}(a)$ 为复数，共包含 $2n^2$ 个实参数，因此阶 $r=2n^2$.

2．$GL(n,\ R)$——一般的实线性变换群

限制矩阵元为实数，共包含 n^2 个参数，其阶 $r=n^2$.

3．$SL(n,\ c)$，$SL(n,\ R)$——特殊线性变换群

要求 $GL(n,\ c)$ 中复矩阵 $R(a)$ 的行列式为 1，就得到 $SL(n,\ c)$，阶 $r=2n^2-1$．要求

$GL(n, R)$中实矩阵 $R(a)$的行列式为 1, 就得到 $SL(n, R)$, 阶 $r=n^2-1$

显然有 $GL(n, c)\supset SL(n, c)\supset SL(n, R)$,

$GL(n, R)\supset SL(n, R)$.

4. U_n 和 SU_n——酉群、幺模酉群

限制矩阵 $R(a)$为幺正矩阵, 即满足

$$R(a)R^\dagger(a)=R^\dagger(a)R(a)=1, \tag{5-72a}$$

就得到酉群 U_n, 阶数 $r=n^2$. 由(5-72a)式可知其矩阵元满足条件 $|R_{\alpha\beta}(a)|\leqslant 1$, 因此酉群为紧致群. 由(5-72a)式还得到

$$\det R(a)=e^{i\varphi}. \tag{5-72b}$$

如果进一步限制 $R(a)$的行列式为 1 (即上式相角 $\varphi=2n\pi$), 则得到幺模酉群 SU_n, 阶数 $r=n^2-1$. 幺正条件(5-72a)式保证了在酉变换下 $\sum_{\alpha=1}^{n}|x^\alpha|^2$ 为不变量, 即

$$\sum_{\alpha=1}^{n}|x^\alpha|^2=\sum_{\alpha=1}^{n}|x'^\alpha|^2. \tag{5-73}$$

由此看到, 酉变换不违反量子力学中的几率守恒原理. 正是这一事实, 使得酉变换在量子力学中非常重要.

5. $U(n, m)$群

保持

$$\sum_{\alpha=1}^{n}|x^\alpha|^2-\sum_{\beta=n+1}^{n+m}|x^\beta|^2 \tag{5-74}$$

为不变的所有线性变换构成 $U(n, m)$群, 阶数[1] $r=(n+m)^2$. $U(n, m)$ 为非紧致群, 显然 $U_n=U(n, 0)=U(0, n)$, $GL(n+m, c)\supset U(n, m)$. 类似可定义 $SU(n, m)$ 群, 阶数 $r=(n+m)^2-1$.

6. $O(n, c)$群——复正交群

保持 $\sum_{\alpha=1}^{n}(x^\alpha)^2$ 不变的复线性变换全体构成复正交群, 由

$$\sum_{\alpha=1}^{n}(x'^\alpha)^2=\sum_{\alpha\beta\beta'}R_{\alpha\beta}R_{\alpha\beta'}x^\beta x^{\beta'}=\sum_{\beta=1}^{n}(x^\beta)^2, \tag{5-75}$$

得

$$\sum_{\alpha}R_{\alpha\beta}R_{\alpha\beta'}=\delta_{\beta\beta'}. \tag{5-76a}$$

即矩阵 $R(a)$为正交矩阵

$$\widetilde{R}(a)R(a)=1. \tag{5-76b}$$

$O(n, c)$群包含 $\frac{n}{2}(n-1)$个复参数(见 § 5·8), 所以它的阶数 $r=n(n-1)$. 由上式可知

$$\det(\widetilde{R}(a))\det(R(a))=1,$$
$$\det(R(a))=\pm 1. \tag{5-76c}$$

因此, $O(n, c)$ 群变换矩阵可以分成二类, 一类 $\det(R(a))=+1$, 一类 $\det(R(a))=-1$. 行列式为 $+1$ 的正交矩阵构成子群——幺模复正交群 $SO(n,c)$, 代表真转动(proper rotation). $O(n, c)$群可按子群 $SO(n, c)$作陪集分解:

1) 阶数的计算见 § 5.8. 下同.

$$O(n,\ c)=SO(n,\ c)\oplus SO(n,\ c)\times I. \tag{5-77}$$

这里 I 为空间反演算符. 商群 $O(n,\ c)/SO(n,\ c)$为二阶群. 行列式为 -1 的部分, 代表转动反射(rotation-reflection), 或称为非真转动 (improper rotation). $SO(n,\ c)$ 的任一元素可从幺元素出发,经过连续的途径而达到. 而 $\det(R(a))=-1$ 的元素则不能从幺元素出发经过连续的途径而达到. 换言之, $O(n,\ c)$ 群 (以及后面实正交群 O_n) 由两个不相连的部分组成,我们不能从这一部分连续地变化到另一部分.

7. O_n 群——实正交群

限制 $O(n,c)$ 中矩阵 $R(a)$ 为实数,就得到实正交群 O_n[或记为 $O(n)$],阶数 $r=\frac{1}{2}n(n-1)$. 进一步限制 $R(a)$的行列式为 $+1$, 就得到幺模正交群 SO_n, 阶仍为 $\frac{1}{2}n(n-1)$. 显然有

$$O(n,\ c)\supset SO(n,\ c)\supset SO_n,$$

$$O_n\supset SO_n.$$

8. $O(n,\ m)$群

保持

$$\sum_{\alpha=1}^{n}(x^\alpha)^2-\sum_{\beta=n+1}^{n+m}(x^\beta)^2 \tag{5-78}$$

不变的所有实线性变换称为 $O(n,\ m)$群, 阶数 $r=\frac{1}{2}[n(n-1)+m(m-1)]+nm$. $O(n,\ m)$ 为非紧致群. 特例 $O(3,\ 1)$即为洛仑兹群. 显然

$$O_n=O(n,\ 0)=O(0,\ n).$$

9. $SP(2n,\ c)$, $SP(2n,\ R)$, SP_{2n}——复辛群、实辛群、幺正辛群.

若 $\boldsymbol{x}=\mathrm{col}(x^1\cdots x^n,\ x^{-1}\cdots x^{-n})$和 $\boldsymbol{y}=\mathrm{col}(y^1\cdots y^n,\ y^{-1}\cdots y^{-n})$为 $2n$ 维列矢量, $R(a)$为 $2n\times 2n$ 变换矩阵,它把 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 分别变到 $\boldsymbol{x}'$ 和 $\boldsymbol{y}'$:

$$\boldsymbol{x}'=R(a)\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{y}'=R(a)\boldsymbol{y}. \tag{5-79a}$$

保持反对称双线性(skew-symmetric bilinear form)

$$\sum_{\alpha=1}^{n}(x^\alpha y^{-\alpha}-x^{-\alpha}y^\alpha) \tag{5-79b}$$

不变的所有线性变换矩阵 $R(a)$ 构成的群,称为辛群. 如果矩阵 $R(a)$为复(实)矩阵,则称为复辛群 $SP(2n,\ c)$(实辛群 $SP(2n,\ R)$), 阶数为 $r=2n(n+1)\,(n(n+1))$. 若对复辛群进一步限制 $R(a)$为幺正矩阵,则称为幺正辛群 SP_{2n}. 显然有:

$$GL(2n,\ c)\supset SP(2n,\ c)\supset SP(2n,\ R),$$

$$SP(2n,\ c)\supset SP_{2n},\quad SU_{2n}\supset SP_{2n}.$$

§5.7 线性变换群 无穷小算符的求法

若 $x^1,\ \cdots,\ x^n$ 经受一无穷小变换

$$x'=R(a)x,\quad R(a)=1+\mathscr{A}(a), \tag{5-80a}$$

$$\mathscr{A}(a)=a_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}, \tag{5-80b}$$

$$e_{\alpha\beta}=\alpha\text{行}\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & 1 & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}\ (\beta\text{列}). \tag{5-81}$$

这里，$a_{\alpha\beta}$ 为无穷小量，$e_{\alpha\beta}$ 为 $n\times n$ 矩阵，它的第 α 行第 β 列的元素为 1，其余都为零．它满足对易式(5-51)，并有以下关系式

$$e_{\alpha\beta}e_{\gamma\delta}=\delta_{\beta\gamma}e_{\alpha\delta}. \tag{5-82}$$

把(5-80a)写成分量形式：

$$x'^{\alpha}=x^{\alpha}+a_{\alpha\beta}x^{\beta}. \tag{5-80c}$$

现在考虑在变换(5-80)式下，x 的任意函数 $\psi(x)$ 的改变

$$\psi'(x)=\psi(x')=\psi(x^{\alpha}+a_{\alpha\beta}x^{\beta})=\psi(x)+a_{\alpha\beta}x^{\beta}\frac{\partial}{\partial x^{\alpha}}\psi(x). \tag{5-83}$$

定义

$$E_{\beta\alpha}=x^{\beta}\frac{\partial}{\partial x^{\alpha}}, \tag{5-84}$$

(5-83)式表为

$$\psi'(x)=(1+a_{\alpha\beta}E_{\beta\alpha})\psi(x). \tag{5-85}$$

而(5-80c)式表为

$$x'^{\alpha}=(1+a_{\alpha\beta}E_{\beta\alpha})x^{\alpha}. \tag{5-80d}$$

由此得到求线性变换群无穷小算符的一个简单方法：

(1) 先求出无穷小变换(5-80a)中的无穷小矩阵

$$\mathscr{A}=\sum_{\alpha\beta}a_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}. \tag{5-86a}$$

注意，这里不是所有的 $a_{\alpha\beta}$ 都是独立的(除非是 $GL(n, R)$ 或 $GL(n, c)$ 群)

(2) 把上式中矩阵 $e_{\alpha\beta}$ 换成(5-84)式的微分算符 $E_{\beta\alpha}$，得到

$$\sum_{\alpha\beta}a_{\alpha\beta}E_{\beta\alpha}. \tag{5-86b}$$

(3) 将非独立参数 $a_{\alpha\beta}$ 用独立参数 $a^1, \cdots, a^r$ 表示出来，然后依次令

$$a^{\rho}=1,\ \ a^{\sigma}=0,\ \ \sigma\neq\rho,\ \ \rho=1,\ 2,\ \cdots r,$$

就可得到 r 个无穷小算符 X_{ρ}.

例：求 SO_3 群的无穷小算符.

由(5-76)式知 SO_3 群无穷小变换矩阵满足

$$\tilde{R}(a)R(a)=[1+\tilde{\mathscr{A}}(a)][1+\mathscr{A}(a)]\cong 1+\tilde{\mathscr{A}}(a)+\mathscr{A}(a)=1.$$

所以

$$\tilde{\mathscr{A}}(a)+\mathscr{A}(a)=0. \tag{5-87}$$

即 $\mathscr{A}(a)$ 为反对称矩阵，可表为

$$\begin{aligned}\mathscr{A}(a)&=\begin{pmatrix}0 & a^3 & -a^2\\ -a^3 & 0 & a^1\\ a^2 & -a^1 & 0\end{pmatrix} \\ &=a^1(e_{23}-e_{32})+a^2(e_{31}-e_{13})+a^3(e_{12}-e_{21}) \\ &\rightarrow a^1(E_{32}-E_{23})+a^2(E_{13}-E_{31})+a^3(E_{21}-E_{12}).\end{aligned} \tag{5-88}$$

依次令 $(a^1, a^2, a^3)=(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$ 得到 SO_3 群的三个无穷小算符：

$$X_1 = E_{32} - E_{23} = z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z},$$

$$X_2 = E_{13} - E_{31} = x\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}, \tag{5-89}$$

$$X_3 = E_{21} - E_{12} = y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}.$$

令 $X_k = -iJ_k$, 得到角动量算符的微分形式

$$J_x = i\left(z\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial z}\right),\ xyz\ 轮换. \tag{5-90}$$

由此看到，只要求得了无穷小矩阵 $\mathscr{A}$, 就可立即写出无穷小算符.

比较(5-58b)式和(5-90)式，前者为角动量分量作用在三维笛卡尔基上的算符形式，后者为作用在波函数 $\psi(xyz)$ 上的算符形式. 直接验证可知微分算符 $E_{\alpha\beta}$ (5-84)式和矩阵 $e_{\alpha\beta}$ (5-81)式具有相同的对易式:

$$[E_{\alpha\beta},\ E_{\gamma\delta}] = \delta_{\beta\gamma}E_{\alpha\delta} - \delta_{\alpha\delta}E_{\gamma\beta}. \tag{5-91}$$

如果取 n 个单粒子态 $\varphi_1, \cdots, \varphi_n$ 作为 n 维空间的基，线性变换(5-80c)式变成

$$\varphi'_\alpha = \varphi_\alpha + a_{\alpha\beta}\varphi_\beta. \tag{5-92}$$

引入产生算符 $C^\dagger_\alpha$ 和消灭算符 C_α:

$$C^\dagger_\alpha|0\rangle = \varphi_\alpha,\quad C_\alpha|0\rangle = 0. \tag{5-93}$$

它们满足对易式

$$C^\dagger_\alpha C^\dagger_\beta \pm C^\dagger_\beta C^\dagger_\alpha = 0, \tag{5-94}$$

$$C_\alpha C^\dagger_\beta \pm C^\dagger_\beta C_\alpha = \delta_{\alpha\beta}. \tag{5-95}$$

上式对费米子取正号，对波色子取负号. 于是(5-92)式可写成

$$\varphi'_\alpha = (1 + a_{\alpha\beta}C^\dagger_\beta C_\alpha)\varphi_\alpha. \tag{5-96}$$

比较(5-96)式和(5-80d)式可知作用在单粒子态上，无穷小算符 $E_{\beta\alpha}$ 可表为

$$E_{\beta\alpha} = C^\dagger_\beta C_\alpha. \tag{5-97}$$

以下我们不再区分无穷小生成元 $e_{\alpha\beta}$ 和无穷小算符 $E_{\alpha\beta}$. 视具体作用对象，$e_{\alpha\beta}$ 可取以下几种形式

$$e_{\alpha\beta}:\quad x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\beta},\quad C^\dagger_\alpha C_\beta,\quad \alpha\text{行}\overset{\beta\text{列}}{\begin{pmatrix} & \vdots & \\ \cdots & 1 & \cdots \\ & \vdots & \end{pmatrix}}. \tag{5-98}$$

§5.8 n 维空间度规张量和李群无穷小算符

如果已经知道李群群元 $R(a)$ 或其无穷小元素 $R(a)=1+\mathscr{A}(a)$, 就可由(5-37)式或 §5·7 给出的方法求出李群的无穷小算符. 本节将讨论如何由 n 维空间的度规张量 $g_{\alpha\beta}$ 定出无穷小矩阵 $\mathscr{A}(a)$, 从而给出李群的无穷小算符.

给定 n 维空间的一组基底 $\{u_\alpha\}$, 并规定了度规张量 $g_{\alpha\beta}$. 也就给定了一个不变量. 我们保持基底 $\{u_\alpha\}$ 不变，而让 $x \to x'$. 对 sesquilinear 度规，不变量为

$$x^{\alpha *}g_{\alpha\beta}x^\beta = x'^{\alpha *}g_{\alpha\beta}x'^\beta. \tag{5-99a}$$

对双线性度规，不变量为

$$x^{\alpha}g_{\alpha\beta}x^{\beta}=x'^{\alpha}g_{\alpha\beta}x'^{\beta}. \tag{5-99b}$$

根据§5·6，保持某一个量不变的所有线性变换 $x'=R(a)x$ 构成一个李群$\{R(a)\}$，因此一个度规张量对应于一个李群．对 sesquilinear 度规，由(5-99a)式我们有

$$x^{\alpha *}g_{\alpha\delta}x^{\delta}=x'^{\beta *}g_{\beta\gamma}x'^{\gamma}=R^{*}_{\beta\alpha}(a)x^{\alpha *}g_{\beta\gamma}R_{\gamma\delta}(a)x^{\delta}. \tag{5-100}$$

所以

$$g_{\alpha\delta}=R^{*}_{\beta\alpha}(a)g_{\beta\gamma}R_{\gamma\delta}(a). \tag{5-101}$$

即

$$g=R^{\dagger}(a)gR(a). \tag{5-102}$$

将 $R(a)=1+iB(a)$ 代入(5-102)式，这里 $B(a)$ 为无穷小矩阵，并略去二级项，得出

$$B^{\dagger}(a)g=gB(a). \tag{5-103}$$

类似地，对双线性度规由(5-99b)式得

$$g=\widetilde{R}(a)gR(a). \tag{5-104}$$

令 $R=1+\mathscr{A}(a)$，$\mathscr{A}(a)$为无穷小矩阵，得到

$$\widetilde{\mathscr{A}}(a)g=-g\mathscr{A}(a). \tag{5-105}$$

或写成

$$a_{\alpha\beta}g_{\alpha\gamma}=-g_{\beta\alpha}a_{\alpha\gamma}. \tag{5-106}$$

(5-103)和(5-105)式是我们进一步讨论的出发点，利用它们，我们可根据给定的度规张量定出无穷小算符．

1. U_n 群

比较(5-99a)式和(5-73)式，可知 sesquilinear 对称度规

$$g_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}. \tag{5-107}$$

对应于酉群．根据(5-103)式和(5-107)式，无穷小矩阵 $B(a)$必为厄米

$$B^{\dagger}(a)=B(a). \tag{5-108}$$

例如，对 U_3 群，$B(a)$取以下形式

$$B(a)=\begin{pmatrix} c_1 & a_1-ib_1 & a_2-ib_2 \\ a_1+ib_1 & c_2 & a_3-ib_3 \\ a_2+ib_2 & a_3+ib_3 & c_3 \end{pmatrix}. \tag{5-109}$$

分别令 $a_1,\ a_2,\ a_3,\cdots,c_1,\ c_2,\ c_3$ 9个参数中一个为1，其余为零，得到 U_3 群的9个无穷小算符

$$X_1=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_2=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X_3=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},$$

$$X_4=\begin{pmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix},\quad X_5=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\quad X_6=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},$$

$$X'_7=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X'_8=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad X'_9=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}. \tag{5-110}$$

对酉群常常取实的无穷小生成元 $e_{\alpha\beta}$[(5-81)式]

$$R(a)=1-ia_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta},\tag{5-111}$$

这时群参数为复数，且满足 $a^*_{\alpha\beta}=a_{\beta\alpha}$.

容易看到单位矩阵 $I=\sum_{\alpha=1}^{n}e_{\alpha\alpha}$ 构成 U_n 群李代数的不变子代数. 所以 U_n 群不是半纯群.

根据 $x_\alpha x^\alpha=\sum_\alpha (x^\alpha)^* x^\alpha$ 为酉群的不变量，可知共变量 x_α 是逆变量 x^α 的复数共轭，

$$x_\alpha=x^{\alpha *}.\tag{5-112}$$

我们还可通过下式引入混合型度规 g^β_α

$$x^\alpha x_\alpha=x^\alpha g^\beta_\alpha x_\beta.\tag{5-113}$$

因此

$$g^\beta_\alpha=\delta_{\alpha\beta}.\tag{5-114}$$

容易证明 g^β_α 为不变量

$$g'^{\beta}_{\alpha}=R_{\beta\delta}R^*_{\alpha\gamma}g^\delta_\gamma=R_{\beta\delta}R^*_{\alpha\delta}=\delta_{\alpha\beta}.\tag{5-115}$$

p 个逆变矢量 q 个共变矢量构成一混合张量

$$T^{\alpha\beta\cdots\gamma}_{ij\cdots k}=x^\alpha y^\beta\cdots z^\gamma u_i v_j\cdots w_k.\tag{5-116}$$

定义 n 级逆变反对称张量 $\epsilon^{i_1 i_2\cdots i_n}$:

$$\epsilon^{i_1 i_2\cdots i_n}=\begin{cases}1 & \text{若 } p=\begin{pmatrix}1, & 2, & \cdots, & n\\ i_1, & i_2, & \cdots, & i_n\end{pmatrix} \text{为偶置换}\\ -1 & \text{若 } p=\begin{pmatrix}1, & 2, & \cdots, & n\\ i_1, & i_2, & \cdots, & i_n\end{pmatrix} \text{为奇置换}\\ 0 & \text{任意两个指标相同.}\end{cases}\tag{5-117}$$

对 n 级共变反对称张量 $\epsilon_{i_1 i_2\cdots i_n}$ 有类似的式子. 在 U_n 群变换下

$$\begin{aligned}&\epsilon^{i_1 i_2\cdots i_n}\to\epsilon'^{i_1 i_2\cdots i_n}\\ &=\sum_{j_1\cdots j_n}R_{i_1 j_1}(a)R_{i_2 j_2}(a)\cdots R_{i_n j_n}(a)\epsilon^{j_1 j_2\cdots j_n}\\ &=\det(R(a))\epsilon^{i_1 i_2\cdots i_n}.\end{aligned}\tag{5-118}$$

由于 SU_n 群要求 $\det(R(a))=1$，故 $\epsilon^{i_1 i_2\cdots i_n}$ 为 SU_n 群的不变量. 类似地可证明 $\epsilon_{i_1 i_2\cdots i_n}$ 也是 SU_n 的不变量.

2. SU_n 群

SU_n 要求群 $R(a)$ 的行列式为 1，对无穷小元素有

$$\det(R(a))=\det(1+iB)=1+i\sum_\alpha B_{\alpha\alpha}+\cdots=1.\tag{5-119}$$

因此矩阵 B 的迹为零

$$\text{Trace}\,B=0.\tag{5-120}$$

例如，对 SU_2 群，B 可取为

$$B=\begin{pmatrix}c & a-ib\\ a+ib & -c\end{pmatrix}.\tag{5-121}$$

令 $(a,\ b,\ c)=(1,\ 0,\ 0)$, $(0,\ 1,\ 0)$, $(0,\ 0,\ 1)$ 得到 $SU(2)$ 群的三个生成元

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\tag{5-122}$$

即为三个泡利矩阵.

U_3 群的 9 个无穷小算符 $X_1\cdots X'_9$ 中 [(5-120a) 式]，前 6 个已经满足零迹要求，X'_7, X'_8, X'_9 则不满足零迹要求. 可将它们组合成一个单位矩阵和二个零迹矩阵，例如

$$X_7=\begin{pmatrix}1 & & \\ & -1 & \\ & & 0\end{pmatrix},\quad X_8=\sqrt{\frac{1}{3}}\begin{pmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & & -2\end{pmatrix}. \tag{5-123}$$

(5-110) 式中的 $X_1\cdots X_6$ 和上式的 X_7, X_8 构成 SU_3 群的八个无穷小算符，也就是 Gell-Man 在层子模型中最早取用的. 零迹张量(5-123)还可以有其它选择. 对 SU_n 群，生成元也可以取为实矩阵，非对角元取 $e_{\alpha\beta}$[(5-81)式]，对角元有许多种取法，常见的有

$$(1)\quad h_i=e_{ii}-\frac{1}{n}I=\begin{pmatrix}-1/n & & & & \\ & \ddots & & & \\ \cdots\cdots & & (n-1)/n & & \cdots\cdots \\ & & & \ddots & \\ & & & & -1/n\end{pmatrix} i\text{ 行}. \tag{5-124}$$

$$\sum_{i=1}^{n} h_i=0. \tag{5-125}$$

因此只有 $n-1$ 个 h_i 为独立.

$$(2)\quad h_i=\left(\sum_{j=1}^{i} e_{jj}-ie_{i+1,i+1}\right)\Big/(i+1),\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1. \tag{5-126}$$

例如，SU_4 群

$$h_1=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & & & \\ & -1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 0\end{pmatrix},\quad h_2=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -2 & \\ & & & 0\end{pmatrix},\quad h_3=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & -3\end{pmatrix}. \tag{5-127}$$

SU_n 为半纯群，属于经典群 A_l, $l=n-1$(l 个 h_i 互相对易，所以秩为 $l=n-1$).

3. $U(n,\ m)$群

由(5-74)式和(5-99a)式可知，对应于 $U(n,\ m)$群的度规张量是

$$g_{\alpha\beta}=\delta_\alpha\delta_{\alpha\beta},\quad \delta_\alpha=\begin{cases}1, & \alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n\\ -1, & \alpha=n+1,\ n+2,\ \cdots,\ n+m.\end{cases} \tag{5-128}$$

根据(5-103)和(5-128)式，可知 $U(n,\ m)$群的无穷小元素必取以下形式

$$R(a)=1+i\left(\begin{array}{c|c}B_n & B_{nm}\\ \hline B_{mn} & B_{mm}\end{array}\right), \tag{5-129}$$

$$B_n=B_n^\dagger,\quad B_m=B_m^\dagger,\quad B_{nm}=-B_{mn}^\dagger. \tag{5-130}$$

B_n, B_m, B_{nm} 分别为 $n\times n$, $m\times m$ 和 $n\times m$ 矩阵. 由此可立即写出 $U(n,\ m)$ 群的无穷小算符. $U(n,\ m)$群的阶数 $r=n^2+m^2+2nm=(n+m)^2$

至于 $SU(n,\ m)$群，则还需附加条件

$$\text{Trace}(B_n)+\text{Trace}(B_m)=0, \tag{5-131}$$

$$r=(n+m)^2-1. \tag{5-132}$$

4. 实正交群 O_n

(1) 笛卡尔基

比较(5-75)式和(5-99b)式我们知道和正交群相对应的度规是双线性对称度规

$$g_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}.\tag{5-133}$$

因此对正交变换来说共变和逆变合一. 由(5-105)式和(5-133)式可知, $\mathscr{A}$ 为一反对称矩阵,

$$\widetilde{\mathscr{A}}=-\mathscr{A}.\tag{5-134}$$

它共有 $r=\frac{1}{2}n(n-1)$ 个实参数. 于是

$$\mathscr{A}=\sum_{\alpha>\beta=1}^{n}a_{\beta\alpha}(e_{\beta\alpha}-e_{\alpha\beta})\to\sum_{\alpha>\beta=1}a_{\beta\alpha}(E_{\alpha\beta}-E_{\beta\alpha}).\tag{5-135}$$

由(5-135)式、(5-84)式得 O_n 群无穷小算符为

$$L_{\alpha\beta}=-L_{\beta\alpha}=x_\alpha\frac{\partial}{\partial x_\beta}-x_\beta\frac{\partial}{\partial x_\alpha}=C_\alpha^\dagger C_\beta-C_\beta^\dagger C_\alpha,\tag{5-136}$$

$$L_{\alpha\alpha}=0.$$

利用(5-91)式容易算出对易式

$$\begin{aligned}&[L_{\alpha\beta},\ L_{\beta\gamma}]=L_{\alpha\gamma},\ \text{对}\ \alpha\neq\beta\neq\gamma\\&[L_{\alpha\beta},\ L_{\gamma\delta}]=0\quad\text{如果}\ \alpha\beta\gamma\delta\ \text{全不相同}.\end{aligned}\tag{5-137}$$

(5-137)式是 O_3 群(5-89)式的推广.

(2) 球基(spherical bases)

物理上常常不用笛卡尔基, 例如三维空间中, 常取 x^1, x^0, x^{-1} 为基

$$x^1=-\sqrt{\frac{1}{2}}(x+iy),\quad x^0=z,\quad x^{-1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(x-iy).\tag{5-138}$$

它们是角动量 $l=1$ 的三个分量.

推广到一般情形, 令 ψ_{jm} 为 J^2, J_z 的本征函数, 令 O_n 群的基为

$$x^\alpha=\psi_{j,\alpha},\qquad \text{当}\ n\ \text{为奇数},\ n=2j+1\tag{5-139a}$$

$$x^\alpha=\psi_{j,\alpha\mp\frac{1}{2}},\quad \text{当}\ n\ \text{为偶数},\ n=2j+1,\ \alpha\neq0\tag{5-139b}$$

后一式中当 $\alpha>0$ 时取负号, $\alpha<0$ 时取正号.

O_n 群不变量为

$$\sum_{\alpha=-\left[\frac{n}{2}\right]}^{\left[\frac{n}{2}\right]}(-1)^\alpha x^\alpha x^{-\alpha}=\text{Invariant}.\tag{5-140}$$

这里 $\left[\frac{n}{2}\right]$ 代表取 $\frac{n}{2}$ 的整数值(注意当 n 为偶数时 $\alpha\neq0$). 因此度规张量

$$g_{\alpha\beta}=(-1)^\alpha\delta_{\alpha,-\beta}.\tag{5-141}$$

由(5-104)式和(5-141)式得

$$(-1)^\gamma a_{-\gamma\beta}=-(-1)^\beta a_{-\beta\gamma}.\tag{5-142}$$

令 $-\gamma\to\alpha$, $\gamma\to-\alpha$ 得

$$(-1)^\alpha a_{\alpha\beta}=-(-1)^\beta a_{-\beta,-\alpha}.\tag{5-143a}$$

于是 $a_{00}=0$, 而

$$\begin{aligned}\mathscr{A}(a)&=a_{\beta\alpha}e_{\beta\alpha}=\sum_{\beta\geq0,\alpha}(a_{\beta\alpha}e_{\beta\alpha}+a_{-\alpha,-\beta}e_{-\alpha-\beta})\\&=\sum_{\beta\geq0,\alpha}(-1)^\alpha a_{\beta\alpha}((-1)^\alpha e_{\beta\alpha}-(-1)^\beta e_{-\alpha-\beta})\\&\to\sum_{\beta\geq0,\alpha}(-1)^\alpha a_{\beta\alpha}((-1)^\alpha E_{\alpha\beta}-(-1)^\beta E_{-\beta-\alpha}).\end{aligned}\tag{5-143b}$$

所以在度规(5-142)式下, O_n 群的无穷小算符为

$$L_{\alpha\beta}=-L_{-\beta-\alpha}=(-1)^{\alpha}x^{\alpha}\frac{\partial}{\partial x^{\beta}}-(-1)^{\beta}x^{-\beta}\frac{\partial}{\partial x^{-\alpha}}. \tag{5-144a}$$

由此看到由(5-143a)式可直接写出(5-144a)式. O_n 群中互相对易的算符为

$$H_{\alpha}=L_{\alpha\alpha},\ \ \alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ \left[\frac{n}{2}\right]. \tag{5-144b}$$

$O(2l+1)$ 群属于经典群 B_l, 秩为 l. $O(2l)$ 群属于经典群 D_l, 秩为 l.

将(5-140)式和轨道角动量为零的双粒子波函数

$$\Psi_{L=0}=\sum_{m=-l}^{l}(-1)^{l-m}\psi_{lm}(1)\psi_{l-m}(2) \tag{5-145}$$

相对照, 可知在 $O(2l+1)$ 群变换下, $L=0$ 的态 (5-145) 式保持不变. 但 j 为半整数时, $O(2j+1)$ 群并不保持角动量为零的双粒子波函数

$$\Psi_{J=0}=\sum_{m=-j}^{j}(-1)^{j-m}\psi_{jm}(1)\psi_{j-m}(2) \tag{5-146}$$

不变. 保持上式不变的是辛群 $SP(2j+1,\ c)$(见后面讨论).

例 1　SO_2 群

α 只取两个值 1 和 -1, 由(5-144a)式得到一个无穷小算符

$$-L_{11}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}=\sigma_z.$$

σ_z 构成阿贝尔李代数.

例 2　SO_3 群

α 取值为 1, 0, -1. 由(5-144a)式得到 SO_3 群的三个无穷小算符 L_{10}, L_{-10}, L_{11}, 分别表为 $-J_+$, $-J_-$, $-J_0$:

$$J_+=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\ J_-=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix},\ J_0=\begin{pmatrix}1 & & 0\\ & 0 & \\ 0 & & -1\end{pmatrix}. \tag{5-147}$$

它们满足对易式:

$$[J_+,\ J_-]=J_0,\ \ [J_0,\ J_{\pm}]=\pm J_{\pm}. \tag{5-148}$$

和角动量对易关系相对照, 知

$$J_{\pm}=\sqrt{\frac{1}{2}}[J_x\pm iJ_y],\quad J_0=J_z. \tag{5-149}$$

J_z 构成李代数$(J_+,\ J_-,\ J_0)$的子代数, 为 SO_2 群无穷小算符.

若(5-135)式中的参数为复参数, 就得到复正交群 $O(n,\ c)$, 秩为 $r=n(n-1)$.

5. 实 $O(n,m)$ 群

由不变量(5-78)式得度规张量

$$g_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha}\delta_{\alpha\beta},\ \ \delta_{\alpha}=\begin{cases}1 & \alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ n\\ -1 & \alpha=n+1,\ \cdots,\ n+m.\end{cases} \tag{5-150}$$

类似推导得到

$$\delta_{\alpha}a_{\alpha\beta}=-\delta_{\beta}a_{\beta\alpha}. \tag{5-151}$$

于是

$$\mathscr{A}(a)=\begin{pmatrix}\mathscr{A}_n & \mathscr{A}_{nm}\\ \tilde{\mathscr{A}}_{nm} & \mathscr{A}_m\end{pmatrix}, \tag{5-152}$$

$$\mathscr{A}_n=-\widetilde{\mathscr{A}}_n \quad \mathscr{A}_m=-\widetilde{\mathscr{A}}_m.$$

反对称矩阵 $\mathscr{A}_n$ 和 $\mathscr{A}_m$ 各有 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 和 $\frac{1}{2}m(m-1)$ 个参数，$\mathscr{A}_{nm}$ 有 $n\times m$ 个参数. 所以 $O(n, m)$ 群的阶

$$r=\frac{1}{2}[n(n-1)+m(m-1)]+mn. \tag{5-153}$$

由(5-151)式可立即写出 $O(n,m)$ 群的无穷小算符.

$$L_{\alpha\beta}=\delta_\alpha x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\beta}-\delta_\beta x^\beta\frac{\partial}{\partial x^\alpha}=\delta_\alpha C_\alpha^+C_\beta-\delta_\beta C_\beta^+C_\alpha. \tag{5-154}$$

例 洛仑兹群 $O(3, 1)$

$n=3$, $m=1$, $r=6$. 六个无穷小算符为:

$$L_{ij}=x^i\frac{\partial}{\partial x^j}-x^j\frac{\partial}{\partial x^i},\quad i,\ j=1,\ 2,\ 3,$$

$$L_{i4}=x^i\frac{\partial}{\partial x^4}+x^4\frac{\partial}{\partial x^i},\quad i=1,\ 2,\ 3. \tag{5-155}$$

对于复正交群 $O(n, m, c)$ 可类似处理，只不过现在矩阵 $\mathscr{A}$ 为复矩阵，参数增加一倍.

6. 辛群

(1) 实辛群 $SP(2n, R)$

j 为半整数时，$2n(=2j+1)$ 个 $x^\alpha=\psi_{jm}$, $\alpha=m\pm\frac{1}{2}$[见(5-139b)式]，构成辛群 $SP(2n, R)$ 的基. 由不变量(5-79b)式得度规张量

$$g_{\alpha\beta}=\epsilon_{\alpha\beta}=-\epsilon_{\beta\alpha},$$

$$\epsilon_{\alpha\beta}=\begin{cases}\delta_\alpha, & \text{当 }\alpha=-\beta\\ 0, & \text{当 }\alpha\neq-\beta,\end{cases}\quad \delta_\alpha=\begin{cases}1 & \text{当 }\alpha>0\\ -1 & \text{当 }\alpha<0\end{cases} \tag{5-156}$$

$$\delta_{-\alpha}=-\delta_\alpha.$$

无穷小矩阵满足条件

$$\delta_\alpha a_{\alpha\beta}=-\delta_\beta a_{-\beta-\alpha}. \tag{5-157}$$

所以矩阵 $\mathscr{A}$ 必取以下形式

$$\mathscr{A}=\begin{pmatrix}\mathscr{A}_1 & \mathscr{A}_2\\ \mathscr{A}_3 & -\widetilde{\mathscr{A}}_1\end{pmatrix}\ (\text{列: }1\cdots n,\ -1\cdots -n),\quad \mathscr{A}_2=\widetilde{\mathscr{A}}_2,\ \mathscr{A}_3=\widetilde{\mathscr{A}}_3. \tag{5-158}$$

无穷小算符

$$L_{\alpha\beta}=\delta_\alpha x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\beta}-\delta_\beta x^{-\beta}\frac{\partial}{\partial x^{-\alpha}},\quad \alpha,\ \beta=\pm1,\ \cdots,\ \pm n.$$
$$L_{\alpha\beta}=L_{-\beta-\alpha}. \tag{5-159}$$

$\mathscr{A}_1$ 中有 n^2 个参数，对称矩阵 $\mathscr{A}_2$, $\mathscr{A}_3$ 中各有 $\frac{1}{2}n(n+1)$ 个参数，所以 $SP(2n, R)$ 群共有

$$r=n^2+n(n+1)=n(2n+1) \tag{5-160}$$

个无穷小算符. 它们满足对易式:

$$[L_{\alpha\beta},\ L_{\gamma\delta}]=\delta_{\beta\gamma}\delta_\beta L_{\alpha\delta}-\delta_{\alpha\delta}\delta_\alpha L_{\gamma\beta}+\delta_{\beta\bar\delta}\delta_\beta L_{\alpha\bar\gamma}-\delta_{\alpha\bar\gamma}\delta_\alpha L_{\bar\beta\gamma}. \tag{5-161}$$

其中有 n 个无穷小算符 $H_i=L_{ii}$, $i=1,\ 2,\ \cdots,\ n$ 互相对易. 因此 $SP(2n, R)$ 群的秩为 n，它属于经典群 C_n.

例 $SP(4, R)$群有10个参数，由(5–158)式得：

$$\mathscr{A}=\begin{array}{c} \\ 1 \\ 2 \\ \\ -1 \\ -2 \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cccc} 1 & 2 & -1 & -2 \end{array} \\ \left(\begin{array}{cc|cc} e_1 & \alpha & \gamma & \beta \\ \bar{\alpha} & e_2 & \beta & \delta \\ \hline \bar{\gamma} & \bar{\beta} & -e_1 & -\bar{\alpha} \\ \bar{\beta} & \bar{\delta} & -\alpha & -e_2 \end{array}\right) \end{array}. \tag{5–162}$$

令(5–162)式十个参数中一个为1其余为零，得到$SP(4, R)$群的十个无穷小生成元，再利用对应式(5–98)式即得到十个微分算符

$$\begin{aligned} &H_1=x^1\frac{\partial}{\partial x^1}-x^{-1}\frac{\partial}{\partial x^{-1}}(=L_{11}), \quad H_2=x^2\frac{\partial}{\partial x^2}-x^{-2}\frac{\partial}{\partial x^{-2}}(=L_{22}),\\ &E_\alpha=x^1\frac{\partial}{\partial x^2}-x^{-2}\frac{\partial}{\partial x^{-1}}(=L_{12}), \quad E_\beta=x^1\frac{\partial}{\partial x^{-2}}+x^2\frac{\partial}{\partial x^{-1}}(=L_{1\bar{2}}),\\ &E_\gamma=x^1\frac{\partial}{\partial x^{-1}}(=L_{1\bar{1}}/2), \qquad\qquad E_\delta=x^2\frac{\partial}{\partial x^{-2}}(=L_{2\bar{2}}/2),\\ &E_{\bar{\alpha}}=x^2\frac{\partial}{\partial x^1}-x^{-1}\frac{\partial}{\partial x^{-2}}(=L_{21}), \quad E_{\bar{\beta}}=x^{-1}\frac{\partial}{\partial x^2}+x^{-2}\frac{\partial}{\partial x^1}(=L_{\bar{1}2}),\\ &E_{\bar{\gamma}}=x^{-1}\frac{\partial}{\partial x^1}(=L_{\bar{1}1}/2), \qquad\qquad E_{\bar{\delta}}=x^{-2}\frac{\partial}{\partial x^2}(=L_{\bar{2}2}/2). \end{aligned} \tag{5–163}$$

除了常数因子外，和(5–159)式一致.

(2) 复辛群

令(5–158)式矩阵$\mathscr{A}$为复矩阵，就得到复辛群$SP(2n, c)$的无穷小矩阵，无穷小算符可仍取实数形式(5–159)，而参数$a_{\alpha\beta}$为复数

$$R(a)=1+\sum_{\alpha\beta}{}' a_{\alpha\beta}L_{\alpha\beta}. \tag{5–164}$$

上式只对独立参数求和，阶数为$r=2n(2n+1)$.

(3) 幺正辛群SP_{2n}

SP_{2n}群的无穷小元素可表为

$$R(a)=1+i\sum_{\alpha\beta}{}' a_{\alpha\beta}L_{\alpha\beta}, \tag{5–165}$$

$L_{\alpha\beta}$仍由(5–159)式给出. 这里的参数$a_{\alpha\beta}$需满足厄密条件

$$a_{\alpha\beta}=a^*_{\beta\alpha}.$$

矩阵$\mathscr{A}$取以下形式

$$\mathscr{A}=i\left(\begin{array}{c|c} \mathscr{A}_1 & \mathscr{A}_2 \\ \hline \mathscr{A}_2^\dagger & -\mathscr{A}_1^* \end{array}\right), \quad \mathscr{A}_1=\mathscr{A}^\dagger, \quad \mathscr{A}_2=\widetilde{\mathscr{A}}_2. \tag{5–166}$$

因此幺正辛群SP_{2n}的阶数为$r=n(2n+1)$，秩为n，仍属于经典群C_n. 例如对SP_4有

$$\mathscr{A}=i\left(\begin{array}{cc|cc} e_1 & \alpha & \gamma & \beta \\ \alpha^* & e_2 & \beta & \delta \\ \hline \gamma^* & \beta^* & -e_1 & -\alpha^* \\ \beta^* & \delta^* & -\alpha & -e_2 \end{array}\right). \tag{5–167}$$

这里e_1, e_2为实参数，$\alpha\beta\gamma\delta$为复参数，SP_4的无穷小元素可表为

$$R(a)=1+i(e_1H_1+e_2H_2+\alpha E_\alpha+\alpha^*E_{\bar{\alpha}}+\beta E_\beta+\beta^*E_{\bar{\beta}}+\gamma E_\gamma+\gamma^*E_{\bar{\gamma}}+\delta E_\delta+\delta^*E_{\bar{\delta}}).\tag{5-168}$$

H_1, H_2, E_α, $E_{\bar{\alpha}}\cdots$由(5–163)式给出.

(4) 辛群的不变量常取另一种形式

$$\sum_{\alpha=-n}^{n}x^\alpha(-1)^\alpha\epsilon_{\alpha\beta}y^\beta=\text{Invariant}.\tag{5-169}$$

于是度规张量为

$$g_{\alpha\beta}=(-1)^\alpha\epsilon_{\alpha\beta}.\tag{5-170}$$

这时(5–157)式改为

$$(-1)^\alpha\delta_\alpha a_{\alpha\beta}=-(-1)^\beta\delta_\beta a_{-\beta-\alpha}.\tag{5-171}$$

无穷小算符

$$L_{\alpha\beta}=(-1)^\alpha\delta_\alpha x^\alpha\frac{\partial}{\partial x^\beta}-(-1)^\beta\delta_\beta x^{-\beta}\frac{\partial}{\partial x^{-\alpha}}.\tag{5-172}$$

不难看出，在度规(5–170)式下，$SP(2j+1,\ c)$群(因而其子群$SP(2j+1,\ R)$和SP_{2n})变换下，角动量为零的双粒子态(5–146)式保持不变(j为半整数)，例如$j=3/2$. 由(5–146)、(5–139b)式得

$$\begin{aligned}\Psi_{J=0}&=\frac{1}{2}(\psi_{\frac{3}{2}}\varphi_{-\frac{3}{2}}-\psi_{\frac{1}{2}}\varphi_{-\frac{1}{2}}+\psi_{-\frac{1}{2}}\varphi_{\frac{1}{2}}-\psi_{-\frac{3}{2}}\varphi_{\frac{3}{2}})\\&=\frac{1}{2}(x^3y^{-3}-x^1y^{-1}+x^{-1}y^1-x^{-3}y^{-3}).\end{aligned}$$

§5.9 群上函数空间的无穷小算符

有限群中群元对群上函数的作用(2–87)式对李群仍然成立，即

$$R_b^{-1}u(R_a)=u(R_bR_a).\tag{5-173}$$

令R_b为一无穷小元素

$$R_b=R(\delta a)=1+\delta a^\rho X_\rho(a),\tag{5-174a}$$

$$R_b^{-1}=R^{-1}(\delta a)=1-\delta a^\rho X_\rho(a),\tag{5-174b}$$

$$R_bR_a=R(\delta a)R(a)=R(a+da).\tag{5-175}$$

由李群参数结合律(5–23)式，得

$$a^\sigma+da^\sigma=\varphi^\sigma(a,\ \delta a),\tag{5-176a}$$

$$da^\sigma=\mu_\rho^\sigma(a)\delta a^\rho,\tag{5-176b}$$

$$\mu_\rho^\sigma(a)=\left.\frac{\partial\varphi^\sigma(a,\ b)}{\partial b^\rho}\right|_{b=0}.\tag{5-176c}$$

把(5–173)式中$u(R_a)$写成$u(a)$，$u(R_bR_a)$写成$u(a+da)$，由(5–173)式、(5–174b)式、(5–176)式得

$$(1-\delta a^\rho X_\rho(a))u(a)=u(a+da)=u(a)+\frac{\partial u(a)}{\partial a^\sigma}da^\sigma=u(a)+\frac{\partial u(a)}{\partial a^\sigma}\mu_\rho^\sigma(a)\delta a^\rho.$$

因为δa^ρ为独立变量，由上式得

$$X_\rho(a)u(a)=-\mu_\rho^\sigma(a)\frac{\partial}{\partial a^\sigma}u(a).\tag{5-177a}$$

因此，群上函数空间的无穷小算符X_ρ对应一微分算符

$$X_\rho(a)=-\mu_\rho^\sigma(a)\frac{\partial}{\partial a^\sigma}. \tag{5-177b}$$

Racah 和 Eisenhart 称 $A_\rho(a)=-X_\rho(a)$ 为第一参数群无穷小算符，而我们就称 $X_\rho(a)$ 为第一参数群无穷小算符.

例　求 SO_2 群在群上函数空间的无穷小算符.

SO_2 为单参数阿贝尔群. 若 $R(\varphi_c)=R(\varphi_b)R(\varphi_a)$，则 $\varphi_c=\varphi_a+\varphi_b$. 由(5-177b)(5-176c)式求得无穷小算符

$$X_\varphi=-\frac{\partial(\varphi_a+\varphi_b)}{\partial\varphi_b}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}=-\frac{\partial}{\partial\varphi}.$$

令 $X=-iJ_z$，得到

$$J_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{5-177c}$$

关于 SO_3 群的例子见 §6.1.

§5.10　李群和李代数的同构和反同构，覆盖群

若：

$$[X_\rho,\ X_\sigma]=C_{\rho\sigma}^\tau X_\tau, \tag{5-178a}$$

$$[Y_\rho,\ Y_\sigma]=C_{\rho\sigma}^\tau Y_\tau, \tag{5-178b}$$

且 X_ρ 和 Y_ρ 一一对应，则称李代数 $\{X_\rho\}$ 和李代数 $\{Y_\rho\}$ 同构.

两个李群若它们的李代数同构，则这两个群在恒等变换的邻域局部同构.

例如 SU_2 群的三个无穷小算符

$$S_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\quad S_y=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad S_z=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

和 SO_3 群的三个无穷小算符 $J_xJ_yJ_z$ (5-58b)式一一对应，即 SO_3 和 SU_2 的李代数同构. 因此 SO_3 群和 SU_2 群在幺元素邻域内局部同构.

下面来研究 SO_3 群和 SU_2 群在整个参数范围内的同态情形. 利用泡利矩阵(5-122)式即可得到以 σ_z 的本征函数 $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 为基时，算符 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的矩阵表示

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi}\\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{pmatrix}, \tag{5-179a}$$

θ, φ 为 $\boldsymbol{n}$ 的方位角. 在 σ_z 表象中，任一自旋波函数可表为 $\chi=\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$. 容易求得 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$ 的本征值为 ±1 的本征函数为

$$\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix},\quad \chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-\frac{i}{2}\varphi}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}e^{\frac{i}{2}\varphi}\end{pmatrix}. \tag{5-179b}$$

在 SU_2 群变换[(5-29)式]下，波函数和算符分别按以下两式变换

$$\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}a'\\b'\end{pmatrix}=U\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}, \tag{5-180a}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})\to(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})'=U(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})U^{-1}. \tag{5-180b}$$

令 SU_2 群普遍变换矩阵(5-29)式中的 $\xi=\alpha/2,\ \eta=0$, 得

$$U=A_z(\alpha)=\begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2}\end{pmatrix}. \tag{5-181}$$

由(5-179)式至(5-181)式得

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})'=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}'=\begin{pmatrix} \cos\theta, & \sin\theta e^{-i(\varphi+\alpha)} \\ \sin\theta e^{i(\varphi+\alpha)}, & -\cos\theta\end{pmatrix}, \tag{5-182}$$

$$\chi'_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}\cdot e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\alpha)} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\cdot e^{\frac{i}{2}(\varphi+\alpha)}\end{pmatrix},\quad \chi'_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\theta}{2}\cdot e^{-\frac{i}{2}(\varphi+\alpha)} \\ \cos\dfrac{\theta}{2}\cdot e^{\frac{i}{2}(\varphi+\alpha)}\end{pmatrix}. \tag{5-183}$$

显见 $\chi'_{\pm 1/2}$ 为 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}'$ 的本征函数. 由此可见, SU_2 变换(5-181)式对算符 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ 的作用等价于三维空间中将单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 绕 z 轴转过 α 角, 因此 SU_2 矩阵 $A_z(\alpha)$ (5-181) 式和 SO_3 矩阵 $R_z(\alpha)$ (5-32)式相对应. 类似地令(5-29)式中 $\xi=\zeta=0,\ \eta=\beta/2$, 得

$$U=A_y(\beta)=\begin{pmatrix} \cos\beta/2 & -\sin\beta/2 \\ \sin\beta/2 & \cos\beta/2\end{pmatrix}. \tag{5-184}$$

为简单起见, 并令(5-179)式中 $\varphi=0$, 即让 $\boldsymbol{n}$ 在 xz 平面上. 由(5-179)式、(5-180)式和(5-184)式得

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta\end{pmatrix}\to\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}'=\begin{pmatrix} \cos(\theta+\beta) & \sin(\theta+\beta) \\ \sin(\theta+\beta) & -\cos(\theta+\beta)\end{pmatrix}, \tag{5-185}$$

$$\chi_{1/2}=\begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2} \\ \sin\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}\to\chi'_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix} \cos\left(\dfrac{\theta+\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\dfrac{\theta+\beta}{2}\right)\end{pmatrix}, \tag{5-186}$$

$$\chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix} -\sin\dfrac{\theta}{2} \\ \cos\dfrac{\theta}{2}\end{pmatrix}\to\chi'_{-\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix} -\sin\left(\dfrac{\theta+\beta}{2}\right) \\ \cos\left(\dfrac{\theta+\beta}{2}\right)\end{pmatrix}. \tag{5-187}$$

即 SU_2 变换 $A_y(\beta)$[(5-184)式]对 $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})$ 的作用, 等价于把 $\boldsymbol{n}$ 绕 y 轴转过 β 角, SU_2 矩阵 $A_y(\beta)$ 和 SO_3 矩阵 $R_y(\beta)$(5-32)式相对应. 于是和 SO_3 群矩阵 $\mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)=R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$ (5-34)式相对应的 SU_2 矩阵为

$$D^{\frac{1}{2}}(\alpha\beta\gamma)=A_z(\alpha)A_y(\beta)A_z(\gamma)=\begin{pmatrix} e^{-\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\dfrac{\beta}{2} & -e^{-\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\dfrac{\beta}{2} \\ e^{\frac{i}{2}(\alpha-\gamma)}\sin\dfrac{\beta}{2} & e^{\frac{i}{2}(\alpha+\gamma)}\cos\dfrac{\beta}{2}\end{pmatrix}. \tag{5-188}$$

其实它就是 SO_3 群的 $j=\dfrac{1}{2}$ 的矩阵表示(Roso).

此外容易证明, 若 SU_2 矩阵 A 对应于 SO_3 矩阵 R_A, B 对应于 R_B, 则 SU_2 矩阵 AB 对应于 SO_3 矩阵 R_AR_B, 证明如下:

$$A(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})A^{-1}=\boldsymbol{\sigma}\cdot R_A\boldsymbol{n},\quad B(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})B^{-1}=\boldsymbol{\sigma}\cdot R_B\boldsymbol{n},$$

$$AB(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})(AB)^{-1}=AB(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})B^{-1}A^{-1}=A(\boldsymbol{\sigma}\cdot R_B\boldsymbol{n})A^{-1}=\boldsymbol{\sigma}\cdot R_AR_B\boldsymbol{n}.$$

要注意的是 SU_2 矩阵和 SO_3 矩阵不是一对一对应的，例如由(5-181)和(5-32)式看到

$$A_z(\alpha+2\pi)=-A_z(\alpha),\quad R_z(\alpha+2\pi)=R_z(\alpha). \tag{5-189}$$

绕任一轴转 α 角和 $\alpha+2\pi$ 角的转动在物理上是相同的，但却对应于 SU_2 的不同矩阵. 由此可见，SO_3 和 SU_2 的李代数同构只保证 SO_3 和 SU_2 在幺元素邻域内同构，但大范围内并不同构，而只是同态.

我们可用下列方法推广转动群，即区别绕任一轴转 α 和 $\alpha+2\pi$，而不区别转 α 和 $\alpha+4\pi$ 这样 SU_2 和 SO_3 的元素就一一对应了，SU_2 的每个矩阵对应于不同的"转动". 这个推广了的群的转动群称为覆盖群 (Covering group). SU_2 和转动群的覆盖群同构，所以它们之中一个群的表示也是另一个群的一个表示.

关于李代数同构的例子是很多的，如

$$SU_2\sim SP(2,\ R)\sim SO_3,\quad SO_6\sim SU_4,$$
$$SO_4\sim SP(4,\ R)\text{等等},$$

这里～代表同构.

若李代数 $\{Z_\rho\}$ 和 $\{X_\rho\}$ 的元素一一对应，且对应于(5-178a)式有

$$[Z_\rho,\ Z_\sigma]=-C^\tau_{\rho\sigma}Z_\tau, \tag{5-190}$$

则称李代数 $\{Z_\rho\}$ 和 $\{X_\rho\}$ 反同构. 李代数为反同构的两个李群，在恒等变换邻域内局部反同构. 即若 $R(a)$ 和 $S(a)$ 分别为由 $\{X_\rho\}$ 和 $\{Z_\rho\}$ 产生的李群，则对应于

$$R(a)R(b)=R(c),$$

有

$$S(b)S(a)=S(c). \tag{5-191}$$

若 $\{Z_\rho\}$ 和 $\{X_\rho\}$ 反同构，则显然 $\{-Z_\rho\}$ 和 $\{X_\rho\}$ 同构.

§5.11 不变积分

在推导有关有限群表示的定理时，我们经常用到以下性质

$$\sum_{a=1}^{g}u(R_a)=\sum_{a=1}^{g}u(R_b^{-1}R_a). \tag{5-192}$$

这里 R_b 为一确定元素. (5-192)式意味着对有限群所有元素都给以相同的权重［见(2·73)式］.

为了把有限群的定理推广到李群中去，我们必须把 (5-192) 式表示成对群参数 a 积分的形式，因为有限群中对群元求和到了李群就变成对群参数积分. 为此必须引入密度函数 $\rho(a)=\rho(a^1\cdots a^r)$，它是 r 个参数的函数，使得群上函数 $u(R_a)$ 的积分在参数变换下保持不变：

$$\int_G u(R_a)\rho(a)da=\int_G u(R_b^{-1}R_a)\rho(a)da=\int_G u(R_aR_b^{-1})\rho(a)da,$$
$$da=da^1da^2\cdots da^r. \tag{5-193}$$

可以证明 (Hamermesh, p. 316) 对于紧致李群，可以找到这样的密度函数. 密度函数又称为权函数. (5-193)式称为不变积分. 群上函数标量积的定义(2-84)式推广到李群为:

$$\langle u_1|u_2\rangle=\sum_a u_1^*(R_a)u_2(R_a)\to \tag{5-194}$$

$$\langle u_1|u_2\rangle=\int_G u_1^*(a)u_2(a)\rho(a)da. \tag{5-195}$$

Weyl 证明了 l 秩李群的类算符 $C(\varphi)=C(\varphi^1\cdots\varphi^l)$ 依赖于 l 个参数，$C(\varphi)$ 为属于同一类的所有元素的积分

$$C(\varphi)=\int_{R(a')\in C(\varphi)} R(a')\rho(a')da'. \tag{5-196}$$

同一类元素的数目 g_i 现在变为同一类元素在群参数空间所占的体积 $g(\varphi)$

$$g(\varphi)=\int_{R(a')\in C(\varphi)}\rho(a')da'. \tag{5-197}$$

在 l 个类参数的连续空间可类似地定义密度函数

$$\rho(\varphi)=\rho(\varphi^1,\ \varphi^2,\ \cdots,\ \varphi^l), \tag{5-198}$$

使得类上函数标量积可表为

$$\langle q_1|q_2\rangle=\sum_i g_i q_1^*(C_i)q_2(C_i)\to \tag{5-199}$$

$$\langle q_1|q_2\rangle=\int g(\varphi)q_1^*(\varphi)q_2(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi, \tag{5-200}$$

$$d\varphi=d\varphi^1 d\varphi^2\cdots d\varphi^l.$$

有限群的元素数目 g 现在成了整个群参数空间的体积.

$$g=\sum_{a=1}^{g}1\to g=\int\rho(a)da=\int\rho(\varphi)\,d\varphi\int\rho(a')da'. \tag{5-201}$$

Hamermesh 给出了 SO_3 群的密度函数 $\rho(a)$ 和 $\rho(\varphi)$，但导出过程比较烦复. 我们在下章中，将利用 SO_3 的 CSCO-I 在群上函数空间和类上函数空间的微分算符，根据常微分方程理论，定出密度函数 $\rho(a)$ 和 $\rho(\varphi)$［常微分方程理论中称 ρ 为权函数，见吉洪诺夫第二章(91)式和(92)式］.

§5.12 紧致李群的表示

线性空间 L 中，同态于李群的线性算符群——实际上也即矩阵群，称为李群的一个线性表示或矩阵表示.

一个表示称为可约，如果我们能找到一种基底变换，使该表示的所有矩阵都取下列形式

$$D(R)=\left(\begin{array}{c|c} D^{(1)}(R) & A(R) \\ \hline 0 & D^{(2)}(R)\end{array}\right). \tag{5-202}$$

如果上式中 $A(R)$ 对所有群元 R 全为零矩阵，则此表示称为完全可约的.

对有限群，可约表示一定完全可约，对李群，可约表示不一定完全可约. 例如对一维平移群，$x'=x+a$，可以找到由基函数 $\varphi_1(x)=1$ 和 $\varphi_2(x)=x$ 所荷载的一个二维表示. 在此平移变换下，基函数变到

$$\begin{pmatrix}\varphi_1'(x)\\ \varphi_2'(x)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ x+a\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ a & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\ x\end{pmatrix}, \tag{5-203a}$$

因此该平移群的一个二维表示为

$$D(a)=\begin{pmatrix}1 & a\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{5-203b}$$

它是可约的，但不是完全可约的，即不可能找到一个相似变换使它对角化．一维平移群是一个阿贝尔群，从群论角度看是一个最简单的群，从表示角度看却是最麻烦的．如果一个表示不是完全可约的，则不能把表示问题转化为对不可约表示的研究．而对于完全可约的情形，我们只要搞清了所有不可约表示，那就完全解决了这个群的表示问题．我们的讨论限于半纯李群，就因为半纯李群的有限维表示都是完全可约的．

对于紧致群，任一表示都等价于一个幺正表示，且是完全可约的，每个不可约表示的维数都为有限，正则表示包含了所有的不可约表示，其中每个不可约表示出现的次数等于其维数，等等．总之对于紧致群，有限群表示论的所有结论都可搬过来(Hamermesh p.317)．

由于李代数局部地决定了李群，所以研究李群的表示归结为研究李代数的表示，也即只要对李群的 r 个无穷小算符 X_ρ 都找到一个矩阵表示 $D(X_\rho)$，使得它们满足李代数关系

$$[D(X_\rho),\ D(X_\sigma)]=C_{\rho\sigma}^{\tau}D(X^{\tau}), \tag{5-204}$$

也就解决了李群的表示问题．

1．基本表示

显然 n 维空间的线性变换 $R(a)$ 本身构成该线性变换群的一个表示，称为基本表示，维数为 n．与此相应，这个群的 r 个无穷小生成元构成该李代数的基本表示．例如，SU_3 群的八个无穷小生成元 $X_1,\ \cdots,\ X_8$[(5-110)和(5-123)式]为 SU_3 李代数的基本表示．

2．伴随表示(adjoint representation)

在有限群中，对应群 G 的每一个元素 R_a，我们按下式定义一个算符 $\mathring{R}_a$

$$\mathring{R}_aS=R_aSR_a^{-1}=T,\quad S\in G. \tag{5-205}$$

这样定义的算符 $\mathring{R}_a$ 也构成群 G 的一个表示，称为伴随表示．

对李群我们令 S 为一无穷小元素

$$S=1+\epsilon X_\rho, \tag{5-206a}$$

于是(5-205)式中的 T 也为一无穷小元素，可表为

$$T=1+\epsilon\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(a)X_\sigma. \tag{5-206b}$$

将(5-206)式代入(5-205)式，并注意 $\mathring{R}(a)$ 作用在幺元素 e 上结果为 $\mathring{R}(a)e=R(a)eR^{-1}(a)=e$，就得到

$$\mathring{R}(a)X_\rho=R(a)X_\rho R^{-1}(a)=\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(a)X_\sigma. \tag{5-207}$$

上式表明，李群 G 的 r 个无穷小算符 $X_\rho(\rho=1,\ 2,\ \cdots,\ r)$荷载一个 r 维表示，称为李群 G 的伴随表示，记为(ν_0)．伴随表示是一个很重要的概念，后面我们还会经常碰到它．

假定 r 个函数 $\psi_\rho^{(\nu_0)}$ 在李群 G 的作用下按伴随表示 $\mathscr{D}^{(\nu_0)}$ 变换：

$$R(a)\psi_\rho^{(\nu_0)}=\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(a)\psi_\sigma^{(\nu_0)}, \tag{5-208a}$$

$$\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(a)=\langle\psi_\sigma^{(\nu_0)}|R(a)|\psi_\rho^{(\nu_0)}\rangle\equiv\langle\nu_0\sigma|R(a)|\nu_0\rho\rangle. \tag{5-208b}$$

令

$$R(a)=1+\delta a^{\tau}X_\tau,\quad \mathring{R}(a)=1+\delta a^{\tau}\mathring{X}_\tau. \tag{5-209}$$

于是(5-208b)式变为

$$\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(a)=\delta_{\sigma\rho}+\delta a^{\tau}\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(X_\tau), \tag{5-210a}$$

$$\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}(X_\tau)=\langle\nu_0\sigma|X_\tau|\nu_0\rho\rangle. \tag{5-210b}$$

将(5-209)式和(5-210)式代入(5-207)式得到:

$$\mathring{X}_\tau X_\rho=[X_\tau,\ X_\rho]=\mathscr{D}^{(\nu_0)}_{\sigma\rho}(X_\tau)X_\sigma. \tag{5-211}$$

比较(5-211)和(5-43)式,得到无穷小算符 X_τ 在伴随表示中的矩阵表示式:

$$\mathscr{D}^{(\nu_0)}_{\sigma\rho}(X_\tau)=C^\sigma_{\tau\rho}. \tag{5-212}$$

根据§5.5, 单纯群对应于单纯李代数, 而单纯李代数是不包含不变子代数的李代数, 即在 r 个无穷小算符中,我们不可能找到一个子集 $A_s=(X_i,\ X_j,\ \cdots,\ X_k)$, $k<r$, 它们在 r 个无穷小算符 $\{X_\tau\}$ 的"作用"下为封闭:

$$\mathring{X}_\tau X_i\equiv[X_\tau,\ X_i]\in A_s.$$

倘使伴随表示为可约, 则上式成立, 这意味着对应的李代数不是单纯的. 由此可见, 单纯李群的伴随表示为不可约表示.

3. r 维空间的度规张量

r 个无穷小算符 $\{X_\alpha\}(\alpha=1,\ 2,\ \cdots,\ r)$ 构成 r 维空间的共变基矢[1]. 现在来定义这个空间中任意两个基矢 X_α 和 X_β 的标量积——即度规张量 $g_{\alpha\beta}$

$$g_{\alpha\beta}=(X_\alpha,\ X_\beta)=\mathrm{Trace}(\mathscr{D}^{(\nu_0)}(X_\alpha)\mathscr{D}^{(\nu_0)}(X_\beta))=C^\sigma_{\alpha\rho}C^\rho_{\beta\sigma}. \tag{5-213a}$$

$g_{\alpha\beta}$ 为二级共变张量. 它在基底变换(5-17a)下,变为

$$g'_{\alpha\beta}=C'^{\sigma}_{\alpha\rho}C'^{\rho}_{\beta\sigma},\qquad\qquad g'=Bg\widetilde{B}. \tag{5-213b}$$

任意两个矢量 $X_A=a^\alpha X_\alpha$ 和 $X_B=b^\beta X_\beta$ 的标量积为:

$$(X_A,\ X_B)=a^\alpha b^\beta(X_\alpha,\ X_\beta)=a^\alpha g_{\alpha\beta}b^\beta. \tag{5-214}$$

卡当(Cartan)定理: 一个李代数为半纯的充要条件是度规张量 $g_{\alpha\beta}$ 的行列式不为零:

$$\det\|g_{\alpha\beta}\|\neq0. \tag{5-215}$$

根据李代数的结构常数 $C^\sigma_{\alpha\rho}$, 就可由(5-213a)式作出 $g_{\alpha\beta}$. 再由(5-215)式就可立即判断它是否为半纯的.

我们限于讨论半纯群,因此由 $g_{\alpha\beta}$ 可求出逆变度规张量 $g^{\alpha\beta}$.

利用 $g^{\alpha\beta}(g_{\alpha\beta})$ 可使共(逆)变指标变到逆(共)变指标

$$X^\alpha=g^{\alpha\beta}X_\beta,\quad X_\alpha=g_{\alpha\beta}X^\beta. \tag{5-216}$$

§5.13 李群的不变算符和 Casimir 算符

若 $I(X_\rho)$ 是由 r 个无穷小算符组成的一个算符,它在群 G 作用下不变,

$$I(X'_\rho)=I(R(a)X_\rho R^{-1}(a))=R(a)I(X_\rho)R^{-1}(a)=I(X_\rho), \tag{5-217a}$$

即

$$[R(a),\ I(X_\rho)]=0, \tag{5-217b}$$

则称 $I(X_\rho)$ 为群 G 的不变算符. 换言之 $I(X_\rho)$ 相对于群操作是一个标量.

下面证明不变算符必和所有的无穷小算符都对易. 令(5-217)式中 $R(a)$ 为无穷小变换

$$I(X'_\rho)=\exp(\delta a^\sigma X_\sigma)I(X_\rho)\exp(-\delta a^\tau X_\tau)=I(X_\rho), \tag{5-218}$$

δa 为无穷小量. 将指数函数展开,即得

$$[X_\sigma,\ I(X_\rho)]=0,\qquad \sigma=1,\ 2,\ \cdots,\ r. \tag{5-219}$$

---

1) 注意区分这里的 r 维空间和前面的普通 n 维空间,如 SU_3 的八个无穷小算符 $E_{ij}=x^i\dfrac{\partial}{\partial x^j}-\dfrac{1}{3}\delta^i_j x^l\dfrac{\partial}{\partial x^l}$ ($i=1,\ 2,\ 3$)是普通 $n=3$ 维空间的二级混合张量,但在 $r=8$ 维空间却被看作一组共变向量 X_ρ.

反之，若算符 $I(X_\rho)$ 和所有的无穷小算符都对易，则 $I(X_\rho)$ 为群 G 的不变算符。

利用度规张量，很容易找到一个二次不变式

$$C = X_\alpha g^{\alpha\beta} X_\beta = X_\alpha X^\alpha. \tag{5-220}$$

C 称为 Casimir 算符．根据前面所述

$$[X_\sigma, C] = 0, \quad \sigma = 1, 2, \cdots, r. \tag{5-221}$$

上式也可利用(5-43)式，(5-44)式直接验证．利用张量收缩，可以构成更高次的不变式，如

$$C^{(3)} = C^{\beta_2}_{\alpha_1\beta_1} C^{\beta_3}_{\alpha_2\beta_2} C^{\beta_1}_{\alpha_3\beta_3} X^{\alpha_1} X^{\alpha_2} X^{\alpha_3}. \tag{5-222}$$

等等，$C^{(3)}$ 等称为广义 Casimir 算符．

不变算符不限于 Casimir 算符，还可以有多种方法构成不变算符，如 Gelfand 不变算符等等(见 §7.2)．

可以证明 l 秩半纯李群存在 l 个不变算符(见 Racah 书)

$$C = (I_1(X_\rho), \cdots, I_l(X_\rho)). \tag{5-223}$$

它们构成 l 元类上函数空间 $q(\varphi^1, \varphi^2, \cdots, \varphi^l)$ 中的完备算符集(即在此空间中，C 的本征值完全没有简并)．我们称它为*李群的第一类完备算符集*(CSCO-I)．

例如：$SO(3)$ 群为 $l=1$ 秩李群，只有一个不变算符 $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$．它即为 $SO(3)$ 群的 CSCO-I．

§5.14 内禀李群

1．李群和内禀李群之间的关系和有限群情形完全一样．对任一李群 G，可定义一个与 G 对易而又反同构的内禀李群 $\overline{G}$，群 $\overline{G}$ 的元素对群 G 任一元素 $R(a)$ 的作用定义为

$$\overline{R}(b) R(a) = R(a) R(b). \tag{5-224}$$

群 $\overline{G}$ 和 G 的李代数也互相对易和反同构

$$[X_\tau, \overline{X}_\rho] = 0, \quad \tau, \rho = 1, 2, \cdots, r,$$

$$[X_\tau, X_\rho] = C^\sigma_{\tau\rho} X_\sigma, \quad [\overline{X}_\tau, \overline{X}_\rho] = -C^\sigma_{\tau\rho} \overline{X}_\sigma. \tag{5-225}$$

由(5-224)式得到内禀群元 $\overline{R}(b)$ 和 $R(b)$ 的关系为

$$\overline{R}(b) = R(a) R(b) R(a)^{-1}, \quad \text{当 } R(b) \text{ 作用在 } R(a) \text{ 上时}. \tag{5-226a}$$

必须特别注意(5-224)式和(5-226a)式都不是算符恒等式，(5-226a)式仅仅表明 $R(b)$ 对 G 中某一元素 $R(a)$ 作用时，等价于 $R(a)R(b)R(a)^{-1}$，对 G 中另一个元素 $R(c)$ 作用时，它就不再等价于 $R(a)R(b)R^{-1}(a)$ 了，而应是

$$\overline{R}(b) R(c) = R(c) R(b), \quad \overline{R}(b) = R(c) R(b) R^{-1}(c).$$

换句话说，(5-226a)式中的 $R(a)$ 不是群 G 的一个固定的元素，而是一个动态元素，它随 $\overline{R}(b)$ 的作用对象而变．

为了由(5-226a)式导出无穷小算符 $\overline{X}_\rho$ 和 X_ρ 的关系，我们首先证明

$$\overline{R}(b) u(a) = R(a) R(b) R^{-1}(a) u(a), \tag{5-226b}$$

这里 $u(a)$ 为群上函数．有限群中内禀群元对群上函数的作用(3-138)式对李群也成立．于是上式左方为

$$\overline{R}(b) u(a) = \overline{R}(b) u(\overline{R}(a)) = u(R(a) R^{-1}(b)). \tag{5-226c}$$

再根据(2-87b)，(5-226b)式右方等于

$$R(a)R(b)R^{-1}(a)u(a)=u((R(a)R(b)R^{-1}(a))^{-1}R(a))=u(R(a)R^{-1}(b)).$$

于是(5-226b)式成立. 该式对任意 a, b 均成立, 因此是一个恒等式. 令 $R(b)$ 为一无穷小元素

$$R(b)=1+\delta b^{\rho}X_{\rho}, \tag{5-226d}$$

对应的内禀群元为

$$\overline{R}(b)=1+\delta b^{\rho}\overline{X}_{\rho}. \tag{5-226e}$$

当作用在以 a 为宗量的群上函数上时, $X_{\rho}\to X_{\rho}(a)$, $\overline{X}_{\rho}\to\overline{X}_{\rho}(a)$. $X_{\rho}(a)$为微分算符, 由(5-177b)式给出, $\overline{X}_{\rho}(a)$的表达式将由后面的(5-234)式给出. 将(5-226d)和(5-226e)式代入(5-226b)式得

$$(1+\delta b^{\rho}\overline{X}_{\rho}(a))u(a)=R(a)(1+\delta b^{\rho}X_{\rho}(a))R^{-1}(a)u(a)$$

由于上式对任意函数 $u(a)$均成立, 于是得出 $\overline{X}_{\rho}(a)$和 $X_{\rho}(a)$的关系

$$\overline{X}_{\rho}(a)=R(a)X_{\rho}(a)R^{-1}(a). \tag{5-227}$$

由前面我们知道, 群 G 的 r 个无穷小算符 $\{X_{\rho}\}$ 构成群 G 伴随表示的基. 由(5-207)式和(5-227)式得到

$$\overline{X}_{\rho}(a)=\sum_{\sigma}\mathscr{D}^{(\nu_0)}_{\sigma\rho}(a)X_{\sigma}(a). \tag{5-228a}$$

由上一式又可得到

$$X_{\sigma}(a)=\sum_{\rho}(\mathscr{D}^{(\nu_0)}(a))^{-1}_{\rho\sigma}\overline{X}_{\rho}(a). \tag{5-228b}$$

(5-228)式就是李群 G 和内禀李群 $\overline{G}$ 的无穷小算符的关系式. 因为(5-227)式和(5-228)式中的群参数 a 为变数, 所以

$$[X_{\rho}(a),\ \mathscr{D}^{(\nu_0)}(a)]\neq 0,\quad [\overline{X}_{\rho}(a),\ \mathscr{D}^{(\nu_0)}(a)]\neq 0.$$

(此对易式的显示式见(5-259)式和(5-262)式). 另一方面, 如果令(5-227)式中, 群元 R 的宗量 a 为一常数 a_0, 令(5-227)式左方的 $X_{\rho}(a)\to X'_{\rho}(a)$, 则得到

$$X'_{\rho}(a)=R(a_0)X_{\rho}(a)R^{-1}(a_0)=\sum_{\sigma}\mathscr{D}^{(\nu_0)}_{\sigma\rho}(a_0)X_{\sigma}(a). \tag{5-229}$$

因为 a_0 为常数, 现在有

$$[X_{\rho}(a),\ \mathscr{D}^{(\nu_0)}(a_0)]=[X'_{\rho}(a),\ \mathscr{D}^{(\nu_0)}(a_0)]=0.$$

这就决定了李代数$\{X'_{\rho}\}$和 $\{X_{\rho}\}$ 同构, 但不对易. (5-229)式可看作从 r 维矢量空间中的一个固定坐标系到另一个固定坐标系的变换. a_0 代表两个固定坐标系之间的"方位角", 而(5-227)式则可看作从一个固定坐标系到一个"活动坐标系"(或称内禀坐标系)的变换, 其中参数 a 是个变数而不是常数(因为活动坐标系相对于固定坐标系的"方位角" a 是动态变量)因而决定了李代数 $\{\overline{X}_{\rho}\}$ 和 $\{X_{\rho}\}$ 反同构而不是同构, 并且 $\overline{X}_{\rho}$ 和 X_{τ} 对易. 前面讲过, 群 G 的无穷小算符$\{X_{\rho}\}$可看作 r 维空间中矢量 $\boldsymbol{X}$ 在固定坐标轴上的分量, $\{X'_{\rho}\}$ 可看作是 $\boldsymbol{X}$ 在转过了一个角度 a_0 的另一固定坐标轴上的分量, 而内禀群 $\overline{G}$ 的无穷小算符 $\{\overline{X}_{\rho}\}$ 则可看作矢量 $\boldsymbol{X}$ 在内禀坐标轴(即活动坐标轴)上的分量.

以上对内禀群的物理解释, 在第六章关于 SO_3 群的具体例子中, 可以看得更加清楚.

2. 内禀李群在群上函数空间的无穷小算符.

由(5-226c)式得:

$$\overline{R}_b^{-1}u(R_a)=u(R_aR_b). \tag{5-230}$$

和(5-174)至(5-177)式相平行的式子为

$$R_b = R(\delta a) = 1 + \delta a^\rho X_\rho(a),$$
$$\bar{R}_b^{-1} = \bar{R}^{-1}(\delta a) = 1 - \delta a^\rho \bar{X}_\rho(a), \tag{5-231}$$
$$R_a R_b = R(a) R(\delta a) = R(a + da),$$
$$a^\sigma + da^\sigma = \varphi^\sigma(\delta a,\ a), \tag{5-232}$$
$$da^\sigma = \bar{\mu}_\rho^\sigma(a)\delta a^\rho,\quad \bar{\mu}_\rho^\sigma(a) = \left.\frac{\partial \varphi^\sigma(b,\ a)}{\partial b^\rho}\right|_{b=0}. \tag{5-233}$$

因此在群上函数空间，内禀李群的无穷小算符为一微分算符

$$\bar{X}_\rho(a) = -\bar{\mu}_\rho^\sigma(a)\frac{\partial}{\partial a^\sigma}. \tag{5-234}$$

Racah 和 Eisenhart 称 $B_\rho(a) = -\bar{X}_\rho(a)$ 为第二参数群无穷小算符，而我们则称 $\bar{X}_\rho(a)$ 为第二参数群无穷小算符.

关于内禀态的定义也同有限群. 即取内禀轴和外部轴（固定坐标轴）相重合时的组态空间波函数 $\Phi_0(X)$ 为内禀态，

$$\bar{R}(a)\Phi_0(X) = R(a)\Phi(X). \tag{5-235}$$

关于内禀态的进一步讨论见 § 6·6.

§ 5.15 紧致李群表示的本征函数理论

我们在第二章中，把有限群表示论归结为七个基本定理，这些定理对紧致李群也成立[1] 我们可以把它一一翻译到李群中来.

首先证明，和有限群一样，李群 G 和 $\bar{G}$ 的 CSCO-I 相等. 李群 G 的 CSCO-I 由 l 个不变算符(5-223)式构成. 因此需要证明群 G 和群 $\bar{G}$ 的不变算符相等

$$I_i(X_\rho) = I_i(\bar{X}_\rho),\quad i = 1,\ 2,\ \cdots,\ l. \tag{5-236}$$

$I_i(X_\rho)$ 为 r 个无穷小算符的多项式，由(5-227)式可知

$$R(a) X_\rho X_\sigma \cdots X_\tau R^{-1}(a) = R(a) X_\rho R^{-1}(a) R(a) X_\tau R^{-1}(a) \cdots R(a) X_\tau R^{-1}(a)$$
$$= \bar{X}_\rho \bar{X}_\sigma \cdots \bar{X}_\tau. \tag{5-237}$$

因此

$$R(a) I_i(X_\rho) R^{-1}(a) = I_i(\bar{X}_\rho). \tag{5-238}$$

由(5-217a)、(5-238)式即得到(5-236)式.

若 $G(s_1)$ 为李群 G 的一个 l_1 秩子群，它的 CSCO-I 用 $C(s_1)$ 代表

$$C(s_1) = [I_1^{(s_1)}(X_\sigma) \cdots I_{l_1}^{(s_1)}(X_\sigma)]. \tag{5-239}$$

这里 X_σ 为子群 $G(s_1)$ 的无穷小算符. 若 $\bar{G}(s_1)$ 为内禀群 $\bar{G}$ 的一个子群，它和子群 $G(s_1)$ 对易而反同构，它的 CSCO-I 为

$$\bar{C}(s_1) = [I_1^{(s_1)}(\bar{X}_\sigma),\ \cdots,\ I_{l_1}^{(s_1)}(\bar{X}_\sigma)], \tag{5-240}$$

则 $C(s_1) \neq \bar{C}(s_1)$. 若李群 G 有子群链 $G \supset G(s)$, $G(s) \equiv G(s_1) \supset G(s_2) \supset \cdots$ 我们仍用 $C(s)$ 代表由这一串子群的 CSCO-I 所组成的算符集：

$$C(s) = (C(s_1),\ C(s_2),\ \cdots). \tag{5-241a}$$

---

1) 我们没有严格证明这一点，只是借用了 Hamermesh p. 317 中 8.13 节的结论. 对于 SO_2 和 SO_3 群，这种从有限群到紧致李群的推广则确实是完全可证实的.

对于内禀子群链 $\bar{G}\supset\bar{G}(s)$，$\bar{G}(s)\equiv\bar{G}(s_1)\supset\bar{G}(s_2)\supset\cdots$ 有

$$\bar{C}(s)=(\bar{C}(s_1),\ \bar{C}(s_2),\cdots). \tag{5-241b}$$

若算符集 $K=(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 在 r 元群上函数空间的本征值完全没有简并，即 K 为 r 元群上函数空间的完备算符集，则我们称 K 为李群 G 的**第三类完备算符集**，这时的群链称为*正则子群链*，$(C,\ C(s))$ 称为李群 G 的*第二类完备算符集*.

我们知道，r 元函数空间中的完备算符集应由 r 个算符组成，第一类完备算符集 C 由 l 个算符所组成，因此 $C(s)$ 中所包含的算符的个数为 $\frac{1}{2}(r-l)$.

根据上述讨论，并对群 G 的阶 g，i 类元素数目 g_i，类算符 C_i 及标量积等，作了(5-195)式—(5-201)式那样的推广后，就可把第三章有限群表示论中的公式及第三章小结中的七个定理搬到李群中来.

定理 I 李群 G 的 CSCO-I 在类空间的本征算符 $P^{(\nu)}$ 即为到群 G 不可约表示 ν 的投影算符.

$$CP^{(\nu)}=\nu P^{(\nu)},$$

$$P^{(\nu)}=\frac{h_\nu}{g}\int(\chi^{(\nu)}(\varphi))^*C(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi. \tag{5-242}$$

$\chi^{(\nu)}(\varphi)=\chi^{(\nu)}(\varphi^1,\ \varphi^2,\ \cdots,\ \varphi^l)$ 为特征标，它依赖于 l 个类参数 $\varphi^1\cdots\varphi^l$. 投影算符 $P^{(\nu)}$ 仍满足关系式

$$P^{(\nu)}P^{(\mu)}=\delta_{\nu\mu}P^{(\nu)}.$$

定理 II 李群 G 的 CSCO-I 在 l 元类上函数空间的本征函数就是特征标的复共轭.

$$C[\chi^{(\nu)}(\varphi)]^*=\nu[\chi^{(\nu)}(\varphi)]^*. \tag{5-243}$$

CSCO-I 的本征函数满足正交归一完备性

$$\int\frac{g(\varphi)}{g}[\chi^{(\nu)}(\varphi)]^*\chi^{(\nu')}(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi=\delta_{\nu\nu'},$$

$$\sum_\nu\frac{g(\varphi)}{g}[\chi^{(\nu)}(\varphi)]^*\chi^{(\nu)}(\varphi')\rho(\varphi)=\delta(\varphi-\varphi'), \tag{5-244}$$

$$\delta(\varphi-\varphi')=\delta(\varphi^1-\varphi'^1)\cdots\delta(\varphi^l-\varphi'^l).$$

定理 III、IV、V 同有限群(§3·19)一样，但定理 V 中的 $\psi_m^{(\nu)\varkappa}$ 对内禀量子数 $\varkappa$ 的正交性不再成立(见下一章(6-73)式).

定理 VI 李群 G 的 CSCO-III 在群空间的本征算符就是广义投影算符.

$$\begin{pmatrix}C\\C(s)\\\bar{C}(s)\end{pmatrix}P_m^{(\nu)k}=\begin{pmatrix}\nu\\m\\k\end{pmatrix}P_m^{(\nu)k},$$

$$P_m^{(\nu)k}=\frac{h\nu}{g}\int D_{mk}^{(\nu)*}(a)R(a)\rho(a)da. \tag{5-245a}$$

它仍满足关系式

$$P_m^{(\nu)k}P_l^{(\mu)j}=\delta_{\nu\mu}\delta_{kl}P_m^{(\nu)j}, \tag{5-245b}$$

$$(P_m^{(\nu)k})^\dagger=P_k^{(\nu)m}. \tag{5-245c}$$

定理 VII CSCO-III 在 r 元群上函数空间的本征函数就是群 G 不可约矩阵元的复共轭.

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} D_{mk}^{(\nu)*}(a) = \begin{pmatrix} \nu \\ m \\ k \end{pmatrix} D_{mk}^{(\nu)*}(a). \tag{5-246}$$

CSCO-III 的本征函数满足正交归一完备性.

$$\frac{h_\nu}{g}\int D_{mk}^{(\nu)*}(a) D_{m'k'}^{(\nu')}(a)\rho(a)da = \delta_{\nu\nu'}\delta_{mm'}\delta_{kk'},$$

$$\sum_{\nu mk} \frac{h_\nu}{g} D_{mk}^{(\nu)*}(a) D_{mk}^{(\nu)}(a')\rho(a) = \delta(a-a'), \tag{5-247}$$

$$\delta(a-a') = \delta(a^1 - a'^1)\cdots\delta(a^r - a'^r).$$

有限群中的正则表示分解定理对紧致李群也成立. 若群上函数 $f(a)$ 满足平方可积条件

$$\frac{1}{g}\int |f(a)|^2 \rho(a)da \quad 为有限,$$

则任意函数(即没有任何对称性的函数) $f(a)$ 构成李群的正则表示的基 (Gelfand(1963)), 它可用正交归一完备函数组

$$\psi_m^{(\nu)k}(a) = \sqrt{\frac{h_\nu}{g}}\, D_{mk}^{(\nu)*}(a)$$

展开:

$$f(a) = \sum_{\nu mk} b_{mk}^{(\nu)} \psi_m^{(\nu)k}(a),$$

$$b_{mk}^{(\nu)} = \int (\psi_m^{(\nu)k}(a))^* f(a)\rho(a)da. \tag{5-248}$$

因此正则表示中包含了群 G 的所有不可约表示 (ν), $IR(\nu)$ 出现的次数等于其维数 h_ν.

§5.16 李群和内禀李群的不可约张量

李群的不可约张量的定义和有限群的一样(见 §3·17). 即如果有 h_ν 个算符 $T_m^{(\nu)}$ (h_ν 为群 G $IR(\nu)$ 的维数)在群 G 元素 $R(a)$ 作用下的变换性质为

$$T_m'^{(\nu)} = R(a) T_m^{(\nu)} R^{-1}(a) = \sum_l D_{lm}^{(\nu)} T_l^{(\nu)}, \tag{5-249}$$

则 $T_m^{(\nu)}$ 称为群 G 的 (ν) 不可约张量. 考虑 $R(a)$ 为一无穷小元素则可得到不可约张量的一个等价的定义

$$[X_\rho, T_m^{(\nu)}] = \sum_l D_{lm}^{(\nu)}(X_\rho) T_l^{(\nu)}. \tag{5-250}$$

注意 (5-249)式中 $\nu = \nu_0$ (ν_0 为伴随表示)时的 IR 矩阵 $D^{(\nu_0)}$ 和 §5·14 中的 $\mathscr{D}^{(\nu_0)}$ 不一定相同, $D_{lm}^{(\nu_0)}$ 是给定的不可约表示的矩阵元, 而 $\mathscr{D}_{\sigma\rho}^{(\nu_0)}$ 是由无穷小算符 $\{X_\rho\}$ 决定的矩阵元, 我们只能肯定 $\mathscr{D}^{(\nu_0)}$ 和 $D^{(\nu_0)}$ 等价, 但一般两者不等. 因此当给定 IR $D^{(\nu_0)}$, 即选定了 $G \supset G(S)$ 分类基后, 只有适当选择 X_ρ 的线性组合, 才能把它们组合成 IR 张量 $T_\rho^{(\nu_0)}$. 本节我们仍以符号 X_ρ 代表 $T_\rho^{(\nu_0)}$.

这样约定后, 将(5-206)式——(5-229)式中的 $\mathscr{D}^{(\nu_0)}$ 全部改成 $D^{(\nu_0)}$ 后仍然成立. 如(5-211)式可写成

$$[X_\rho, X_\tau] = \sum_\sigma D_{\sigma\tau}^{(\nu_0)}(X_\rho) X_\sigma, \tag{5-251}$$

由 $\{\bar{X}_\rho\}$ 和 $\{X_\rho\}$ 反同构得到:

$$[\overline{X}_\rho, \overline{X}_\tau] = -\sum_\sigma D^{(\nu_0)}_{\sigma\tau}(X_\rho)\overline{X}_\sigma. \tag{5-252}$$

比较(5-250)式和(5-251)式知，无穷小算符$\{X_\rho\}$为单纯李群G的伴随表示(ν_0)的不可约张量$T^{(\nu_0)}_\rho$. 比较(5-251)式和(5-252)式，一个自然的推广是把内禀群无穷小算符$\{\overline{X}_\rho\}$定义为内禀群$\overline{G}$的伴随表示(ν_0)的不可约张量$\overline{T}^{(\nu_0)}_\rho$. 因此内禀李群$\overline{G}$的$(\nu)$不可约张量$\overline{T}^{(\nu)}_\rho$的普遍定义为：

$$[\overline{X}_\rho, \overline{T}^{(\nu)}_k] = -\sum_l D^{(\nu)}_{lk}(X_\rho)\overline{T}^{(\nu)}_l. \tag{5-253}$$

和群G的不可约张量一样，内禀群$\overline{G}$的两个不可约张量$\overline{T}^{\nu_1}_{m_1}$和$\overline{T}^{\nu_2}_{m_2}$也可用群$G$的Clebsch-Gordan系数耦合成另一个不可约张量.

$$\overline{T}^{(\nu)\theta}_m = \sum_{m_1 m_2} C^{(\nu)\theta m}_{\nu_1 m_1, \nu_2 m_2}\overline{T}^{(\nu_1)}_{m_1}\overline{T}^{(\nu_2)}_{m_2}.$$

下面证明群G不可约矩阵元$D^{(\nu)*}_{mk}(a)$和$D^{(\nu)}_{mk}(a)$分别为群G和$\overline{G}$的不可约张量，即

$$D^{(\nu)*}_{mk}(a) = T^{(\nu)}_m, \quad D^{(\nu)}_{mk}(a) = \overline{T}^{(\nu)}_k. \tag{5-254}$$

将$D^{(\nu)}_{mk}(a)$看作群上函数$u(a)$并利用(5-173)式、(5-174)式得：

$$\begin{aligned}(1-\delta a^\rho X_\rho)D^{(\nu)}_{mk}(a) &= D^{(\nu)}_{mk}((1+\delta a^\rho X_\rho)R(a)) \\ &= D^{(\nu)}_{mk}(R(a)) + \delta a^\rho \sum_l D^{(\nu)}_{ml}(X_\rho)D^{(\nu)}_{lk}(R(a)).\end{aligned}$$

$$\therefore \quad X_\rho D^{(\nu)}_{mk}(a) = -\sum_l \langle \nu m | X_\rho | \nu l\rangle D^{(\nu)}_{lk}(a), \tag{5-255a}$$

$$\langle \nu m | X_\rho | \nu l\rangle = D^{(\nu)}_{ml}(X_\rho). \tag{5-256}$$

类似地，由(5-230)式、(5-231)式得到

$$\overline{X}_\rho D^{(\nu)}_{mk}(a) = -\sum_l \langle \nu l | X_\rho | \nu k\rangle D^{(\nu)}_{ml}(a). \tag{5-255b}$$

如果(5-173)式和(5-230)式中的$u(R_a)$取为$\tilde{D}^{-1(\nu)}_{mk}(R_a) = \tilde{D}^{(\nu)}_{mk}(R_a^{-1})$，则得到

$$X_\rho \tilde{D}^{-1(\nu)}_{mk}(a) = \sum_l \langle \nu l | X_\rho | \nu m\rangle \tilde{D}^{-1(\nu)}_{lk}(a), \tag{5-257a}$$

$$\overline{X}_\rho \tilde{D}^{-1(\nu)}_{mk}(a) = \sum_l \langle \nu k | X_\rho | \nu l\rangle \tilde{D}^{-1(\nu)}_{ml}(a). \tag{5-257b}$$

当$D^{(\nu)}$为幺正表示时，上式变成

$$X_\rho D^{(\nu)*}_{mk}(a) = \sum_l \langle \nu l | X_\rho | \nu m\rangle D^{(\nu)*}_{lk}(a), \tag{5-258a}$$

$$\overline{X}_\rho D^{(\nu)*}_{mk}(a) = \sum_l \langle \nu k | X_\rho | \nu l\rangle D^{(\nu)*}_{ml}(a). \tag{5-258b}$$

如果将$D^{(\nu)}_{mk}(a)$等视为算符，(5-255)式和(5-258)式应改写成：

$$[X_\rho, D^{(\nu)}_{mk}(a)] = -\sum_l \langle \nu m | X_\rho | \nu l\rangle D^{(\nu)}_{lk}(a), \tag{5-259a}$$

$$[\overline{X}_\rho, D^{(\nu)}_{mk}(a)] = -\sum_l \langle \nu l | X_\rho | \nu k\rangle D^{(\nu)}_{ml}(a). \tag{5-259b}$$

$$[X_\rho, D^{(\nu)*}_{mk}(a)] = \sum_l \langle \nu l | X_\rho | \nu m\rangle D^{(\nu)*}_{lk}(a), \tag{5-260a}$$

$$[\overline{X}_\rho, D^{(\nu)*}_{mk}(a)] = \sum_l \langle \nu k | X_\rho | \nu l\rangle D^{(\nu)*}_{ml}(a). \tag{5-260b}$$

比较(5-260a)式和(5-250)式，(5-259b)和(5-253)式，可知(5-254)式成立。

利用Wigner-Eckart定理[(3-317)式]得

$$D^{(\nu)}_{lm}(X_\rho) = \langle \nu l | X_\rho | \nu m\rangle = \sum_\theta \langle \nu \| X \| \nu\rangle^\theta C^{(\nu)\theta l}_{\nu m, \nu_0 \rho}. \tag{5-261}$$

这里$\theta = 1, 2, \cdots, (\nu_0\nu\nu)$为多重性指标，$(\nu_0\nu\nu)$为$(\nu_0)\times(\nu)$表示中出现$IR(\nu)$的次数.

将(5-261)式代入(5-259)式、(5-260)式得到：

$$[X_\rho,\ D_{mk}^{(\nu)}(a)]=-\sum_{\theta,t}\langle\nu\|X\|\nu\rangle^{\theta}C_{\nu t,\nu_0\rho}^{(\nu)\theta,m}D_{tk}^{(\nu)}(a), \tag{5-262a}$$

$$[\overline{X}_\rho,\ D_{mk}^{(\nu)}(a)]=-\sum_{\theta t}\langle\nu\|X\|\nu\rangle^{(\theta)}C_{\nu k,\nu_0\rho}^{(\nu)\theta,t}D_{mt}^{(\nu)}(a), \tag{5-262b}$$

$$[X_\rho,\ D_{mk}^{(\nu)*}(a)]=\sum_{\theta t}\langle\nu\|X\|\nu\rangle^{(\theta)}C_{\nu m,\nu_0\rho}^{(\nu)\theta,t}D_{tk}^{(\nu)*}(a), \tag{5-263a}$$

$$[\overline{X}_\rho,\ D_{mk}^{(\nu)*}(a)]=\sum_{\theta t}\langle\nu\|X\|\nu\rangle^{(\theta)}C_{\nu t,\nu_0\rho}^{(\nu)\theta,k}D_{mt}^{(\nu)*}(a). \tag{5-263b}$$

最后给出无穷小算符 X_ρ 和内禀算符 $\overline{X}_\rho$ 的矩阵元之间的重要联系. 利用 R_a 和 $\overline{R}_a$ 的矩阵元的关系(3-200)式,令 R_a, $\overline{R}_a$ 为无穷小元素,则得到一个重要关系

$$\langle\nu m|X_\rho|\nu k\rangle=\langle\nu k|\overline{X}_\rho|\nu m\rangle. \tag{5-264}$$

第六章 转 动 群

三维空间转动群是大家熟悉的，也是最简单的非阿贝尔李群. SO_3 群的表示问题从本征函数问题来讨论也最清楚. 实际上我们关于有限群表示论的本征函数法就是从 SO_3 得到启发而发展起来的，进而再把它推广到其它李群. 本章以 SO_3 群为例来说明前一章讲的本征函数理论如何沟通了有限群和李群的表示理论的. 至于转动群表示论的其它内容，如角动量理论，D 函数，转动群 CG 系数，不可约张量等，可参考 Rose 或 Edmonds 的书.

§6.1 $J_{x,y,z}$ 和 $\bar{J}_{x,y,z}$ 在群上函数空间的微分算符

已知群参数结合律(5-23)式，就可利用(5-177 b)式求出 SO_3 群无穷小算符 J_x, J_y, J_z 在群上函数空间的算符形式. 我们选欧拉角 α, β, γ 作为参数，考虑两个相继的转动的乘积

$$R(\alpha_3\beta_3\gamma_3)=R(\alpha_2\beta_2\gamma_2)R(\alpha_1\beta_1\gamma_1). \tag{6-1a}$$

但用欧拉角作参数时，结合律

$$(\alpha_3\beta_3\gamma_3)=\varphi(\alpha_1\beta_1\gamma_1,\ \alpha_2\beta_2\gamma_2) \tag{6-1b}$$

不易明显给出. 由于 SO_3 群和 SU_2 群准同构，我们可利用 SU_2 群参数结合律以及 SO_3 群参数和 SU_2 群参数的关系间接求出参数结合律(6-1b)式. 为此我们考虑二个相继的 SU_2 变换:

$$\begin{pmatrix} c_0-ic_3, & -c_1-ic_2 \\ c_1-ic_2, & c_0+ic_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_0-ib_3, & -b_1-ib_2 \\ b_1-ib_2, & b_0+ib_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0-ia_3, & -a_1-ia_2 \\ a_1-ia_2, & a_0+ia_3 \end{pmatrix}. \tag{6-2a}$$

由(5-188)式得到(6-1a)式和(6-2a)式中参数之间的关系

$$\begin{aligned}
&a_0=\cos\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2}, \quad a_1=\sin\frac{\beta_1}{2}\cos\frac{\gamma_1-\alpha_1}{2},\\
&a_2=\sin\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\gamma_1-\alpha_1}{2}, \quad a_3=\cos\frac{\beta_1}{2}\sin\frac{\alpha_1+\gamma_1}{2},\\
&b_0=\cos\frac{\beta_2}{2}\cos\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2}, \quad b_1=\sin\frac{\beta_2}{2}\cos\frac{\gamma_2-\alpha_2}{2},\\
&b_2=\sin\frac{\beta_2}{2}\sin\frac{\gamma_2-\alpha_2}{2}, \quad b_3=\cos\frac{\beta_2}{2}\sin\frac{\alpha_2+\gamma_2}{2},
\end{aligned} \tag{6-3}$$

$$\begin{aligned}
&\alpha_3=\tan^{-1}\frac{c_1c_3-c_2c_0}{c_1c_0+c_2c_3}, \qquad \beta_3=2\sin^{-1}\sqrt{c_1^2+c_2^2},\\
&\gamma_3=\tan^{-1}\frac{c_1c_3+c_2c_0}{c_1c_0+c_2c_3}.
\end{aligned} \tag{6-4}$$

由(6-2a)式立即得到 SU_2 群的参数结合律.

$$\begin{aligned}
&c_0=a_0b_0-a_1b_1-a_2b_2-a_3b_3, \quad c_1=a_0b_1+a_1b_0+a_2b_3-a_3b_2,\\
&c_2=a_0b_2-a_1b_3+a_2b_0+a_3b_1, \quad c_3=a_0b_3+a_1b_2-a_2b_1+a_3b_0.
\end{aligned} \tag{6-2b}$$

由(5-177b)式、(5-176c)式知

$$-X_\alpha=\left(\frac{\partial\alpha_3}{\partial\alpha_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left(\frac{\partial\beta_3}{\partial\alpha_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}+\left(\frac{\partial\gamma_3}{\partial\alpha_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma}, \tag{6-5a}$$

$$-X_\beta=\left(\frac{\partial\alpha_3}{\partial\beta_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left(\frac{\partial\beta_3}{\partial\beta_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}+\left(\frac{\partial\gamma_3}{\partial\beta_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma}, \tag{6-5b}$$

$$-X_\gamma=\left(\frac{\partial\alpha_3}{\partial\gamma_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left(\frac{\partial\beta_3}{\partial\gamma_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}+\left(\frac{\partial\gamma_3}{\partial\gamma_2}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma}. \tag{6-5c}$$

这里下标"0"代表取 $\alpha_2=\beta_2=\gamma_2=0$ 时的值．利用

$$\frac{\partial\alpha_3}{\partial\alpha_2}=\sum_{ij}\frac{\partial\alpha_3}{\partial c_i}\frac{\partial c_i}{\partial b_j}\frac{\partial b_j}{\partial\alpha_2}$$

等，以及(6-2)式、(6-5)式，可求得 X_α, X_β, X_γ. 再利用关系式

$$\alpha X_\alpha=-i\alpha J_z,\quad \beta X_\beta=-i\beta J_y,\quad \gamma X_\gamma=-i\gamma J_z,$$

就得到

$$J_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}, \tag{6-6a}$$

$$J_y=\frac{1}{i}\left(-\sin\alpha\operatorname{ctg}\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}+\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{\sin\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right). \tag{6-6b}$$

由(6-5a)式只能得出两个算符 J_y, J_z 的微分表达式$\left(\text{因为 } X_\alpha=X_\gamma=\frac{\partial}{\partial\alpha}\text{ 都对应于 } J_z\right)$，第三个算符 J_x 可根据对易式 $[J_y, J_z]=iJ_x$ 求出

$$J_x=\frac{1}{i}\left(-\cos\alpha\operatorname{ctg}\beta\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{\cos\alpha}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\gamma}\right). \tag{6-6c}$$

(6-6)式就是 SO_3 群第一参数群的无穷小算符，也就是文献[19]中 p.372 的(11)式或Eisenberg p. 98 的(39)式，因此第一参数群的无穷小算符就是角动量 $\boldsymbol{J}$ 在固定坐标轴上的投影 J_x, J_y, J_z 作用在群上函数的具体形式．

现在利用(5-234)式来求内禀群 $\overline{SO}_3$ 的无穷小生成元在群上函数空间的算符形式．根据 $\overline{SO}_3$ 和 SO_3 反同构可知，对应于 SO_3 群元(5-64)式，$\overline{SO}_3$ 的群元为

$$\overline{R}(\alpha\beta\gamma)=e^{-i\gamma\overline{J}_z}e^{-i\beta\overline{J}_y}e^{-i\alpha\overline{J}_z}. \tag{6-7}$$

和(6-5)式相平行的式子现在为：

$$\begin{aligned}-\overline{X}_\alpha&=\left(\frac{\partial\alpha_3}{\partial\alpha_1}\right)_0\frac{\partial}{\partial\alpha}+\left(\frac{\partial\beta_3}{\partial\alpha_1}\right)_0\frac{\partial}{\partial\beta}+\left(\frac{\partial\gamma_3}{\partial\alpha_1}\right)_0\frac{\partial}{\partial\gamma},\\ \left(\frac{\partial\alpha_3}{\partial\alpha_1}\right)&=\sum_{i,j}\frac{\partial\alpha_3}{\partial c_i}\frac{\partial c_i}{\partial a_j}\frac{\partial a_j}{\partial\alpha_1},\\ &\cdots\cdots\end{aligned} \tag{6-8}$$

这里下标"0"代表取 $\alpha_1=\beta_1=\gamma_1=0$ 时的值．最后求得

$$\begin{aligned}\overline{J}_x&=\frac{1}{i}\left(\cos\gamma\operatorname{ctg}\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}+\sin\gamma\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{\cos\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)=-J_x(\alpha\leftrightarrow\gamma),\\ \overline{J}_y&=\frac{1}{i}\left(-\sin\gamma\operatorname{ctg}\beta\frac{\partial}{\partial\gamma}+\cos\gamma\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\gamma}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)=J_y(\alpha\leftrightarrow\gamma),\\ \overline{J}_z&=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}=J_z(\alpha\leftrightarrow\gamma).\end{aligned} \tag{6-9}$$

上式和 Eisenberg p. 96 的(29)式相一致．

容易验证(6-6)式和(6-9)式满足(5-228a)式，即

$$\begin{pmatrix} \bar{J}_x \\ \bar{J}_y \\ \bar{J}_z \end{pmatrix} = \widetilde{\mathscr{D}}(\alpha,\ \beta,\ \gamma) \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix}. \tag{6-10}$$

SO_3 群伴随表示(即 $J=1$ 的表示)的矩阵 $\mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)$ 由(5-34)式给出.

比较(6-10)式和(5-35)式, 可知内禀群 $\overline{SO}_3$ 的生成元 $\bar{J}_x$, $\bar{J}_y$, $\bar{J}_z$ 就是角动量在内禀轴上的投影 J_1, J_2, J_3. 由此得出一个重要结论: 角动量 $\boldsymbol{J}$ 在内禀坐标轴上的投影 J_1, J_2, J_3 构成内禀群 $\overline{SO}_3$ 的生成元, 正如 $\boldsymbol{J}$ 在固定坐标轴上的投影 J_x, J_y, J_z 构成 SO_3 群的生成元一样. 我们把 $\overline{G}$ 取名为内禀群以及前面对内禀群生成元 $\overline{X}_\rho$ 的物理解释都是从 SO_3 群引伸出来的.

由(6-6)式和(6-9)式容易验证(5-236)式, 即 SO_3 和 $\overline{SO}_3$ 群的 CSCO-I 相等

$$J_x^2+J_y^2+J_z^2=\bar{J}_x^2+\bar{J}_y^2+\bar{J}_z^2$$

Louck 和 Galbraith (1976), Louck (1970)、(1965) 讨论了固定坐标系和内禀坐标系之间的变换. Louck 和 Biedenharn (1970), Biedenharn, Giovannini 和 Louck (1968) 又把这种讨论推广到了 U_n 群等.

§ 6.2 SO_2 群的不可约表示

SO_2 群的元素 $R(\varphi)=e^{-iJ_z\varphi}$. 它是阿贝尔群, 每个元素自成一类, 其类算符 $C(\varphi)$ 仍为 $e^{-iJ_z\varphi}$. SO_2 群的生成元为 J_z. SO_2 为一秩李群, 它的 CSCO-I 应由一个不变算符组成. 因此, 显然 J_z 就是 SO_2 群的 CSCO-I.

有限群的 CSCO-I 是由少数类算符组成的, 而 l 秩李群的 CSCO-I 是由 l 个不变算符 $\{I_i(X_\rho)\}$ 组成的, 人们要问这两者之间有没有什么联系? 在有限群中我们证明了群 G 的所有类算符必足以组成群 G 的 CSCO-I, 把此结论推广到李群, 那就意味着李群 G 的所有类算符(无穷多个)必足以构成李群的 CSCO-I. 例如对 SO_2 群, 无穷多个类算符

$$C(\varphi)=e^{-iJ_z\varphi},\quad 0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi, \tag{6-11}$$

必足以构成 SO_2 群的 CSCO-I. 但是另一方面, 我们又知道李群的性质由幺元素邻域的性质决定, 因此只需取幺元素邻域的类算符就足以构成 CSCO-I 了. 将(6-11)式 $C(\varphi)$ 在 $\varphi=0$ 展开得:

$$C(\varphi)=1-i\varphi J_z+\cdots. \tag{6-12}$$

由此看到, 由有限群外推过来的 CSCO-I (无穷多个类算符 $C(\varphi)$) 和李群表示论得到的 CSCO-I (由不变算符 J_z 所组成) 之间有简单的联系. 将前者在幺元素邻域展开, 就可导出后者.

由于 SO_2 群为阿贝尔群, 所以 J_z 是 CSCO-I 也是 CSCO-III. 根据 § 3.19 定理 VII, 它在群上函数空间的本征函数就是不可约矩阵元(也即为特征标)的复数共轭 $\chi^{(m)*}(\varphi)$. 而由(5-177c)知 $J_z=-i\frac{\partial}{\partial\varphi}$, $\chi^{(m)*}(\varphi)$ 满足本征方程

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}\chi^{(m)*}(\varphi)=m\chi^{(m)*}(\varphi). \tag{6-13}$$

下面分两种情形考虑

(1) SO_2 群为 SO_3 群的子群

由于 $\varphi=0$ 和 2π 对应于参数空间同一点，故要求 $\chi^{(m)}(\varphi)$满足周期性边界条件

$$\chi^{(m)}(\varphi=0)=\chi^{(m)}(\varphi=2\pi). \tag{6-14}$$

于是(6-13)式的本征解为

$$\chi^{(m)}(\varphi)=e^{-im\varphi}, \quad m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{6-15}$$

显然(6-13)式的本征函数在(0, 2π)区间内以权函数

$$\rho(\varphi)=1 \tag{6-16}$$

构成正交完备函数组，SO_2 的群体积为

$$g=\int_0^{2\pi}d\varphi=2\pi. \tag{6-17}$$

于是正交归一完备性(5-247)式为

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\chi^{(m)*}(\varphi)\chi^{(m')}(\varphi)d\varphi=\delta_{mm'}, \tag{6-18}$$

$$\frac{1}{2\pi}\sum_{m=0,\pm1,\cdots}\chi^{(m)*}(\varphi)\chi^{(m)}(\varphi')=\delta(\varphi-\varphi'). \tag{6-19}$$

投影算符(5-245a)式为:

$$P^{(m)}=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}e^{-i(J_z-m)\varphi}d\varphi. \tag{6-20}$$

(2) SO_2 群为 SU_2 群的子群

由§5.10 知道，现在 $\varphi=0$ 和 $\varphi=2\pi$ 不对应于同一个群元，而是 $\varphi=0$ 和 $\varphi=4\pi$ 对应于同一个群元，因此边界条件(6-14)式应改为

$$\chi^{(m)}(\varphi=0)=\chi^{(m)}(\varphi=4\pi). \tag{6-21}$$

(6-13)式的本征解仍为(6-15)式，但 m 既可取整数也可取半整数

$$\chi^{(m)}(\varphi)=e^{-im\varphi}, \quad m=0,\ \pm\frac{1}{2},\ \pm1,\ \pm\frac{3}{2},\ \cdots \tag{6-22}$$

$\rho(\varphi)$仍等于 1，但群体积 $g=4\pi$. 正交归一完备性变为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{4\pi}\int_0^{4\pi}\chi^{(m)*}(\varphi)\chi^{(m')}(\varphi)d\varphi=\delta_{mm'},\\&\frac{1}{4\pi}\sum_{m=0,\pm\frac{1}{2},\pm1,\cdots}\chi^{(m)*}(\varphi)\chi^{(m)}(\varphi')=\delta(\varphi-\varphi').\end{aligned} \tag{6-23}$$

投影算符

$$P^{(m)}=\frac{1}{4\pi}\int_0^{4\pi}e^{-i(J_z-m)\varphi}d\varphi. \tag{6-24}$$

m 为整数的表示称为 SO_2 群的向量表示，而 m 为半整数的表示称为 SO_2 群的旋量表示，或双值表示，因为这时 $\chi(2\pi)=-1$ 而不是等于 1，而角度 2π 和 0 其实为对应于空间同一点.

§6.3 SO_3 群和 SU_2 群的 CSCO-I 和特征标

第五章中已讲过，SO_3 群和 SU_2 群的 CSCO-I 为 J^2，现在研究它和 SO_3 群类算符的关系.

根据§1.5，绕空间任一轴转过相同角度 φ 的所有转动属于同一类．绕空间某一轴 $\boldsymbol{n}(\theta'\varphi')$（$\theta'$, φ' 为 $\boldsymbol{n}$ 的方位角）转过 φ 的转动算符为

$$R_{n(\theta'\varphi')}(\varphi)=e^{-i(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J})\varphi},\quad 0\leqslant\theta'\leqslant\pi,\ 0\leqslant\varphi\leqslant\pi,\ 0\leqslant\varphi'\leqslant2\pi. \tag{6-25}$$

根据(5-196)式，得到 SO_3 群的类算符为

$$C(\varphi)=\int_0^{2\pi}d\varphi'\int_0^{\pi}\sin\theta'\,d\theta'\exp[-i(J_x\sin\theta'\cos\varphi'+J_y\sin\theta'\sin\varphi'+J_z\cos\theta')\varphi]. \tag{6-26}$$

当 φ 较小时，作展开

$$\begin{aligned}C(\varphi)=&\int_0^{2\pi}d\varphi'\int_0^{\pi}\Big[1-i(J_x\sin\theta'\cos\varphi'+J_y\sin\theta'\sin\varphi'+J_z\cos\theta')\varphi\\&-\frac{1}{2}(J_x^2\sin^2\theta'\cos^2\varphi'+J_y^2\sin^2\theta'\sin^2\varphi'+J_z^2\cos^2\theta')\varphi^2\\&-\frac{1}{2}(J_xJ_y+J_yJ_x)\sin^2\theta'\cos\varphi'\sin\varphi'+(J_zJ_x+J_xJ_z)\sin\theta'\cos\theta'\cos\varphi'\\&+(J_yJ_z+J_zJ_y)\sin\theta'\cos\theta'\sin\varphi']\varphi^2+\cdots\Big]\sin\theta'\,d\theta'\,d\varphi'\\=&4\pi\Big[1-\frac{1}{3!}(J_x^2+J_y^2+J_z^2)\varphi^2+\cdots\Big].\end{aligned} \tag{6-27}$$

这里又一次看到，由有限群理论外推过来的 SO_3 群的 CSCO-I（无穷多个类算符 $C(\varphi)$ 即(6-26)式）和李群表示论得到的 SO_3 群的 CSCO-I（$J^2=J_x^2+J_y^2+J_z^2$）之间的联系．

根据(5-197)式 $C(\varphi)$ 类中所包含的群元的体积为

$$g(\varphi)=\int_0^{2\pi}d\varphi'\int_0^{\pi}\sin\theta'\,d\theta'=4\pi \tag{6-28}$$

即和 φ 无关．

为了求出类参数空间的密度函数和 SO_3 群的特征标，我们要知道 J^2 在类上函数空间的微分算符．为此先求出以 $(\theta',\ \varphi',\ \varphi)$ 为群参数时的 J_x, J_y, J_z 的微分算符，即利用(5-177b)式求 SO_3 群的第一参数群无穷小算符．和(6-1)式相类似，考虑两个相继转动的乘积

$$R(\theta_3'\varphi_3'\varphi_3)=R(\theta_2'\varphi_2'\varphi_2)R(\theta_1'\varphi_1'\varphi_1). \tag{6-29}$$

以 $(\theta'\varphi'\varphi)$ 为参数时，参数结合律不易明显给出，我们仍然通过(6-2a)式的 SU_2 群参数结合律间接地找到 $(\theta'\varphi'\varphi)$ 的参数结合律．(6-2a)式中的 SU_2 群参数和 $(\theta'\varphi'\varphi)$ 的关系为（斯米尔诺夫，p. 315,（276)式）

$$\begin{aligned}&a_0=\cos\varphi_1/2, &&a_1=\sin\theta_1'\cos\varphi_1'\sin\varphi_1/2,\\&a_2=\sin\theta_1'\sin\varphi_1'\sin\varphi_1/2, &&a_3=\cos\theta_1'\sin\varphi_1/2.\end{aligned} \tag{6-30}$$

将上式左边 $a\to b(a\to c)$，右边下指标 $1\to2(1\to3)$ 可得出另外八个关系，类似于(6-5a)式，有

$$-X_\varphi=\Big(\frac{\partial\theta_3'}{\partial\varphi_2}\Big)_0\frac{\partial}{\partial\theta'}+\Big(\frac{\partial\varphi_3'}{\partial\varphi_2}\Big)_0\frac{\partial}{\partial\varphi'}+\Big(\frac{\partial\varphi_3}{\partial\varphi_2}\Big)_0\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{6-31}$$

式中 $(\ \ )_0$ 代表 $\varphi_2=0$．容易证明对应于参数 θ' 和 φ' 的无穷小算符 $X_{\theta'}$ 和 $X_{\varphi'}$ 为零．利用

$$\Big(\frac{\partial\theta_3'}{\partial\varphi_2}\Big)_0=\Big(\frac{\partial\theta_3'}{\partial c_i}\Big)_0\frac{\partial c_i}{\partial b_j}\cdot\Big(\frac{\partial b_j}{\partial\varphi_2}\Big)_0, \tag{6-32}$$

....

以及(6-2b)、(6-30)等式子可求出 X_φ．另一方面根据 $e^{\varphi X_\varphi}=e^{-i(J\cdot n)\varphi}$ 得

$$X_\varphi=-i(\sin\theta'\cos\varphi'J_x+\sin\theta'\sin\varphi'J_y+\cos\theta'J_z). \tag{6-33}$$

比较(6-31)式和(6-33)式，可得到

$$
\begin{aligned}
J_x=&\frac{1}{i}\Big[\sin\theta'\cos\varphi'\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2}(\sin\varphi'+\cos\theta'\cos\varphi'\operatorname{ctg}\varphi/2)\frac{\partial}{\partial\theta'}\\
&+\frac{\cos\theta'\cos\varphi'\sin\varphi/2-\sin\varphi'\cos\varphi/2}{2\sin\theta'\sin\varphi/2}\frac{\partial}{\partial\varphi'}\Big],\\
J_y=&\frac{1}{i}\Big[\sin\theta'\sin\varphi'\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{1}{2}(-\cos\varphi'+\cos\theta'\sin\varphi'\operatorname{ctg}\varphi/2)\frac{\partial}{\partial\theta'}\\
&+\frac{\cos\theta'\sin\varphi'\sin\varphi/2+\cos\varphi'\cos\varphi/2}{2\sin\theta'\sin\varphi/2}\frac{\partial}{\partial\varphi'}\Big],\\
J_z=&\frac{1}{i}\Big[\cos\theta'\frac{\partial}{\partial\varphi}-\frac{1}{2}\sin\theta'\operatorname{ctg}\varphi/2\frac{\partial}{\partial\theta'}-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\varphi'}\Big],\\
J^2=&-\frac{1}{\sin^2\varphi/2}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin^2\varphi/2\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)-\frac{1}{4\sin^2\varphi/2\sin\theta'}\frac{\partial}{\partial\theta'}\left(\sin\theta'\frac{\partial}{\partial\theta'}\right)\\
&-\frac{1}{4\sin^2\varphi/2\sin^2\theta'}\frac{\partial^2}{\partial\varphi'^2}.
\end{aligned}
\tag{6-34}
$$

根据§3.19定理II，SO_3群的特征标$\chi^{(\nu)}(\varphi)$满足本征方程

$$J^2\chi^{(\nu)}(\varphi)=\nu\chi^{(\nu)}(\varphi).\tag{6-35a}$$

即

$$-\frac{1}{\sin^2\varphi/2}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\sin^2\varphi/2\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\chi^{(\nu)}(\varphi)=\nu\chi^{(\nu)}(\varphi).\tag{6-35b}$$

或写成

$$-\frac{1}{\rho(\varphi)}\frac{d}{d\varphi}\left(\rho(\varphi)\frac{d}{d\varphi}\right)\chi^{(\nu)}(\varphi)=\nu\chi^{(\nu)}(\varphi),\tag{6-35c}$$

$$\rho(\varphi)=4\sin^2\varphi/2=2(1-\cos\varphi).\tag{6-36}$$

下面将看到权函数$\rho(\varphi)$就是类参数空间的密度函数．这里$\sin^2\varphi/2$前的系数4是为了和Hamermesh取的密度函数相一致[1]．由(6-36)式、(5-201)式得到SO_3的群体积为

$$g=\int_0^\pi\rho(\varphi)d\varphi\int_0^{2\pi}d\varphi'\int_0^\pi\sin\theta'\,d\theta'=8\pi^2.\tag{6-37}$$

令：

$$u^{(\nu)}(\varphi)=\sin\frac{\varphi}{2}\chi^{(\nu)}(\varphi)\tag{6-38}$$

(6-35b)式变成

$$\frac{d^2u^{(\nu)}(\varphi)}{d^2\varphi}=-\left(j+\frac{1}{2}\right)^2u^{(\nu)}(\varphi),\tag{6-39}$$

$$\left(j+\frac{1}{2}\right)^2=\nu+\frac{1}{4},\quad \nu=j(j+1).$$

其解为$u^{(\nu)}(\varphi)\equiv u^{(j)}(\varphi)=\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi$（另一个解$\cos\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi$无意义，舍去，否则$\chi^{(\nu)}(\varphi=0)\to\infty$）．下面要根据边界条件定出本征值$j$.

由(6-35c)式，利用格林定理得到

$$\rho(\varphi)\left(\chi^{(j')}\frac{d\chi^{(j)}}{d\varphi}-\chi^{(j)}\frac{d\chi^{(j')}}{d\varphi}\right)\Bigg|_a^b=[j(j+1)-j'(j'+1)]\int_a^b\chi^{(j')}\chi^{(j)}\rho(\varphi)d\varphi,\tag{6-40}$$

1) 密度函数放大或缩小任意倍，对结果没有影响．例如从(5-242)式、(5-247)式看到，起作用的因子是比例系数$\rho(\varphi)/g$或$\rho(\alpha)/g$，而群体积$g=\int\rho(\varphi)d\varphi\int\rho(\alpha')d\alpha'$或$g=\int\rho(\alpha)d\alpha$正比于密度函数$\rho(\varphi)$或$\rho(\alpha)$.

$$\chi^{(j)}(\varphi)=\frac{\sin(j+1/2)\varphi}{\sin\varphi/2}. \tag{6-41}$$

若在 φ 的两端边界 a, b 上 $\chi^{(j)}=0$ 或 $\frac{d\chi^{(j)}}{d\varphi}=0$, 则由(6-40)式立刻得到 $\chi^{(j)}$ 在该区间 $[a, b]$ 内以权量 $\rho(\varphi)$ 构成正交完备系

$$\int_a^b \chi^{(j)}(\varphi)\chi^{(j')}(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi=0, \text{ 当 } j\neq j'. \tag{6-42}$$

(6-41)式在端点 $\varphi=0$, π 或 2π 不为零，所以边界条件只能选为

$$\frac{d\chi^{(j)}(\varphi)}{d\varphi}=0, \text{ 当 } \varphi=a, b. \tag{6-43a}$$

由(6-41)式得

$$\frac{d\chi^{(j)}(\varphi)}{d\varphi}=\frac{\left(j+\frac{1}{2}\right)\cos\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi\sin\frac{\varphi}{2}-\frac{1}{2}\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi\cos\frac{\varphi}{2}}{\sin^2\frac{\varphi}{2}}.$$

用洛比达法则求 $\varphi=0$ 或 2π 时的极值

$$\left.\frac{d\chi^{(j)}(\varphi)}{d\varphi}\right|_{\varphi=0\text{ 或 }2\pi}=-j(j+1)\left.\frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi}{\cos\frac{\varphi}{2}}\right|_{\varphi=0\text{ 或 }2\pi} \tag{6-43b}$$

再用一次洛比达法则得到 $\varphi=\pi$ 时的极值

$$\left.\frac{d\chi^{(j)}(\varphi)}{d\varphi}\right|_{\varphi=\pi}=(2j+1)j(j+1)\left.\frac{\cos\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\frac{\varphi}{2}}\right|_{\varphi=\pi}. \tag{6-43c}$$

φ 的端点 a 取为 0, φ 另一端点 b 取 π 还是 2π 则取决于我们讨论的是 SO_3 群还是 SU_2 群.

1) SO_3 群情形

(6-25)式指明 φ 的取值范围为 0 到 π, 因此 $a=0$, $b=\pi$. 由(6-43b)式和(6-43c)式得到量子数 j 必为正整数 $j=0, 1, 2, \cdots$. 于是 $\chi^{(j)}(\varphi)$ 在 $[0, \pi]$ 区间内构成正交归一完备系，求出归一系数后得到

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \chi^{(j)}(\varphi)\chi^{(j')}(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi=\delta_{jj'}, \quad j, j'=0, 1, 2, \cdots. \tag{6-44a}$$

$$\frac{1}{2\pi}\sum_{j=0,1,2,\cdots}\chi^{(j)}(\varphi)\chi^{(j)}(\varphi')\rho(\varphi)=\delta(\varphi-\varphi'). \tag{6-44b}$$

这就是(5-244)式在 SO_3 群情形下的具体形式. 现在 $g=8\pi^2$((6-37)式) $g(\varphi)=4\pi$((6-28)式). 故由微分方程(6-35b)确定的权函数(6-36)式就是密度函数, (6-41)式就是 SO_3 群的特征标.

(2) SU_2 群情形(或 SO_3 覆盖群).

SU_2 群和 SO_3 覆盖群同构. 对于覆盖群来说 φ 的取值范围比(6-25)式规定的范围扩大一倍, 即 φ 的范围为从 0 到 2π, (6-43)式的边界改为 $a=0$, $b=2\pi$. 由边界条件(6-43b)得到, 现在 $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots$. (6-41)式的 $\chi^{(j)}(\varphi)$ 在 $[0, 2\pi]$ 区间构成正交完备系:

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\chi^{(j)}(\varphi)\chi^{(j')}(\varphi)\rho(\varphi)d\varphi=\delta_{jj'}, \quad j, j'=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \tag{6-45a}$$

$$\frac{1}{4\pi}\sum_{j=0,\ \frac{1}{2},1,\ \frac{3}{2},\cdots}\chi^{(j)}(\varphi)\chi^{(j)}(\varphi')\rho(\varphi)=\delta(\varphi-\varphi'). \tag{6-45b}$$

当 j 为整数时，(6-45)式回到(6-44)式.

必须指出，当 j 和 j' 全为半整数时，正交归一性(6-44a)式仍成立．但当 j 为整数，j' 为半整数时，则只有把 φ 的区间扩大到 2π 时正交性才成立，即变为(6-45a)式.

由于幺元素的特征标即为不可约表示的维数，因此令(6-41)式中 $\varphi=0$，得到 SO_3 群不可约表示的维数.

$$h_\nu\equiv h_j=2j+1.$$

由(5-242)式得到 SO_3 群和 SU_2 群投影算符

$$SO_3:\qquad P^{(j)}=\frac{2j+1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi\sin\frac{\varphi}{2}C(\varphi)d\varphi,\ \ j=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{6-46a}$$

$$SU_2:\qquad P^{(j)}=\frac{2j+1}{4\pi^2}\int_0^{2\pi}\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)\varphi\sin\frac{\varphi}{2}C(\varphi)d\varphi,\ \ j=0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \cdots \tag{6-46b}$$

整数 j 的表示称为 SO_3 群的向量表示，半整数 j 的表示称为 SO_3 群的旋量表示或双值表示.

§6.4　SO_3 和 SU_2 群的 CSCO-III 和不可约矩阵元

现在我们在群上函数空间讨论问题．SO_3 群是三参数群，应由三个算符组成完备算符集．因此除 J^2 外还需再找两个算符．SO_3 群包含子群 SO_2，内禀群 $\overline{SO_3}$ 也包含内禀子群 $\overline{SO_2}$，J_z 和 $\overline{J}_z$ 分别为 SO_2 和 $\overline{SO_2}$ 群的 CSCO-I．令 $K=(C,\ C(s),\ \overline{C(s)})=(J^2,\ J_z,\ \overline{J}_z)$．$K$ 为 SO_3 群的 CSCO-III.

选欧勒角为参数，由(6-6)式和(6-9)式得到 K 在群上函数空间的微分算符

$$J^2=-\frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right)-\frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right)-\frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\,\partial\gamma}, \tag{6-47a}$$

$$J_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha},\quad \overline{J}_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\gamma}. \tag{6-47b}$$

J^2，J_z，$\overline{J}_z$ 的共同本征函数就是熟知的 D 函数的复共轭(Rose)

$$\begin{pmatrix}J^2\\ J_z\\ \overline{J}_z\end{pmatrix}D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma)=\begin{pmatrix}j(j+1)\\ m\\ k\end{pmatrix}D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma). \tag{6-48}$$

对应一组 (jmk) 只有一个解 $D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma)$.

(6-48)式可分离变量

$$D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma)=e^{im\alpha}d_{mk}^{(j)}(\beta)e^{ik\gamma}, \tag{6-49}$$

$$\left[-\frac{d}{d\beta}\sin\beta\frac{d}{d\beta}+\frac{1}{\sin\beta}(m^2+k^2-2mk\cos\beta)\right]d_{mk}^{(j)}(\beta)=j(j+1)\sin\beta\, d_{mk}^{(j)}(\beta). \tag{6-50}$$

密度函数（权函数）$\rho(\alpha\beta\gamma)$ 也可分离变量，$\rho(\alpha\beta\gamma)=\rho(\alpha)\rho(\beta)\rho(\gamma)$．对照(6-47b)式和(6-13)式，可知 $\rho(\alpha)=\rho(\gamma)=1$．对照(6-50)式和(6-35c)式可知 $\rho(\beta)=\sin\beta$．所以

$$\rho(\alpha\beta\gamma)=\sin\beta. \tag{6-51}$$

(1) SO_3 群情形

群体积 $$g=\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta d\beta=8\pi^2,$$

和(6-37)式一致. CSCO-III 的本征函数

$$\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma)=\sqrt{\frac{2j+1}{8\pi^2}}D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma),\quad j=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots \tag{6-52}$$

在 α, γ 的区间为 $[0,\ 2\pi]$, β 区间为 $[0,\ \pi]$ 内以权量 $\sin\beta$ 构成正交归一完备函数组

$$\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta\, d\beta(\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma))^*\psi_{m'}^{(j')k'}(\alpha\beta\gamma)=\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{kk'}, \tag{6-53a}$$

$$\sum_{j=0,1,2,\cdots}\sum_{m=-j}^{j}\sum_{k=-j}^{j}(\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma))^*\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma)\sin\beta=\delta(\alpha-\alpha')\delta(\beta-\beta')\delta(\gamma-\gamma'). \tag{6-53b}$$

广义投影算符 $P_m^{(j)k}$ (5-245a)为

$$P_m^{(j)k}=\frac{2j+1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}d\alpha\int_0^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta\, d\beta D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma)R(\alpha\beta\gamma). \tag{6-54}$$

(2) SU_2 群情形

SU_2 群的群体积为(Miller, 1973).

$$g=\int_0^{2\pi}d\alpha\int_{-2\pi}^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta\, d\beta=16\pi^2. \tag{6-55}$$

令

$$\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma)=\frac{\sqrt{2j+1}}{4\pi}D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma),\quad j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots \tag{6-56}$$

它在 α、β、γ 区间分别为 $[0,\ 2\pi]$, $[0,\ \pi]$ 和 $[-2\pi,\ 2\pi]$ 内以权量 $\sin\beta$ 构成正交归一完备函数组.

$$\int_0^{2\pi}d\alpha\int_{-2\pi}^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta\, d\beta(\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma))^*\psi_{m'}^{(j')k'}(\alpha\beta\gamma)=\delta_{jj'}\delta_{mm'}\delta_{kk'}, \tag{6-57a}$$

$$\sum_{j=0,\frac{1}{2},1,\cdots}\sum_{m}\sum_{k}(\psi_m^{(j)k}(\alpha\beta\gamma))^*\psi_m^{(j)k}(\alpha'\beta'\gamma')\sin\beta=\delta(\alpha-\alpha')\delta(\beta-\beta')\delta(\gamma-\gamma'). \tag{6-57b}$$

广义投影算符为

$$P_m^{(j)k}=\frac{2j+1}{16\pi^2}\int_0^{2\pi}d\alpha\int_{-2\pi}^{2\pi}d\gamma\int_0^{\pi}\sin\beta\, d\beta D_{mk}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma)R(\alpha\beta\gamma). \tag{6-58}$$

(6-54)式或(6-58)式的投影算符都满足本征方程

$$\begin{pmatrix}J^2\\ J_z\\ \bar{J}_z\end{pmatrix}P_m^{(j)k}=\begin{pmatrix}j(j+1)\\ m\\ k\end{pmatrix}P_m^{(j)k}. \tag{6-59}$$

§6.5 SO_3 和 SU_2 群的 CSCO-II 和不可约基

$(J^2,\ J_z)$ 构成 SO_3 或 SU_2 群的 CSCO-II, 它是球面参数 $(\theta,\ \varphi)$ 空间中的完备算符集. J^2, J_z 在 $(\theta\varphi)$ 参数空间的微分算符形式是大家在量子力学中熟知的

$$J^2=-\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right),$$

$$J_z=\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{6-60}$$

CSCO-II 的共同本征函数就是球谐函数

$$\begin{pmatrix} J^2 \\ J_z \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi) = \begin{pmatrix} l(l+1) \\ m \end{pmatrix} Y_{lm}(\theta, \varphi). \tag{6-61}$$

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 在 θ 区间 $[0, \pi]$, φ 区间 $[0, 2\pi]$ 内以权量 $\sin\theta$ 构成正交归一完备系:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y^*_{lm}(\theta, \varphi) Y_{l'm'}(\theta, \varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \tag{6-62a}$$

$$\sum_{l=0,1,2,\cdots} \sum_m Y^*_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta', \varphi') \sin\theta = \delta(\theta - \theta')\delta(\varphi - \varphi'). \tag{6-62b}$$

这里 SO_3 的每个不可约表示 l 只出现一次, 因此由 § 3.19 定理 IV 知道 Y_{lm} 为 SO_3 群不可约基.

同样, 如果对某种组态空间, SU_2 群的不可约表示 j 只出现一次, 则解 SU_2 群的 CSCO-II 的本征方程便可求得 $SU_2 \supset SO_2$ 不可约基 $\psi^{(j)}_m$

$$\begin{pmatrix} J^2 \\ J_z \end{pmatrix} \psi^{(j)}_m = \begin{pmatrix} j(j+1) \\ m \end{pmatrix} \psi^{(j)}_m. \tag{6-63}$$

顺便指出, 利用 $\psi^{(j)}_m$ 为 $SU_2 \supset SO_2$ IR 基这一事实, 可以方便地验证特征标公式(6-41)式. 根据特征标只和类有关, 为了求特征标 $\chi^{(j)}(\varphi)$. 只需选绕 z 轴转 φ 角的转动, 于是

$$\begin{aligned} \chi^{(j)}(\varphi) &= \sum_{m=-j}^{j} \langle \psi^{(j)}_m | e^{-iJ_z\varphi} | \psi^{(j)}_m \rangle = \sum_{m=-j}^{j} e^{-im\varphi} \\ &= [e^{ij\varphi} + e^{-ij\varphi} + e^{i(j-1)\varphi} + e^{-i(j-1)\varphi} + \cdots] (e^{i\varphi/2} - e^{-i\varphi/2}) (e^{i\varphi/2} - e^{-i\varphi/2})^{-1} \\ &= \frac{\sin\left(j + \frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\varphi/2}, \end{aligned} \tag{6-64}$$

和(6-41)式一致. 一般书上都用这种方法求 SO_3 群的特征标.

§ 6.6 SO_3 群的内禀态

在组态空间中对不可约表示 j 出现不止一次的情形, 需引入内禀量子数来区分这些属于同一 j 的表示, 为此要先引入 SO_3 群的内禀态.

李群 G 的内禀态 $\Phi_0(X)$ 的定义已由(5-235)式给出. 即

$$\bar{R}(\alpha\beta\gamma)\Phi_0(X) = R(\alpha\beta\gamma)\Phi_0(X). \tag{6-65}$$

我们以形变核的集体转动为例来说明内禀态的意义. 大家知道, 一个非满壳原子核的 HF(Hartree-Fock) 态一般不是球对称的, 假定其密度分布为椭球形. HF 态在空间可以有不同的取向. 如 Φ_1, Φ_{a_0} 等(见下图). $\Phi_{a_0}(X) = R(a_0)\Phi_1(X)$ 或更一般地, $\Phi_a(X) = R(a)\Phi_1(X)$, $R(a)$ 为转动算符.

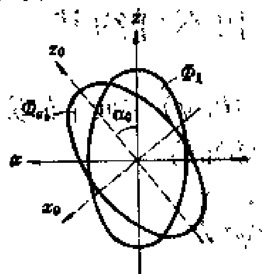


图 6.6-1

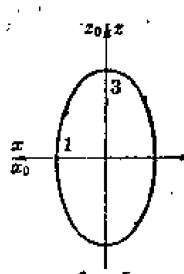


图 6.6-2

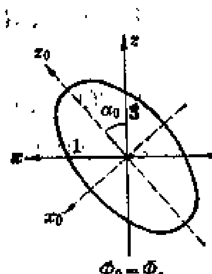


图 6.6-3

所有这些态的 HF 能量都是一样的. 可以定义三种坐标轴: (1)空间固定轴(外部轴) xyz. (2) 椭球对称轴 $x_0y_0z_0$. (3)内禀坐标轴 1, 2, 3. 由(6-65)式定义可知, 内禀坐标轴和外部坐标轴相重合时的 HF 态即为内禀态. 因此在无穷多个 $\{\Phi_a(X)\}$ 中究竟选哪一个态作内禀态, 依赖于内禀轴的选取, 这可分二种情形考虑.

(1) 选椭球对称轴为内禀轴, 即$(x_0y_0z_0)$和轴(1, 2, 3)轴相重合. 这就意味着取 Φ_1 为内禀态 Φ_0(见图 6·6-2).

(2) 内禀轴(1, 2, 3) 和对称轴 (x_0, y_0, z_0) 不重合, 而成夹角 a_0, 这就意味着取 HF 态 $\Phi_{a_0}(X)$ 作为内禀态 Φ_0 (见图 6·6-3).

由此可见, 内禀态选取的任意性正好反映了内禀坐标系选取的任意性. 原则上我们可从 $\{\Phi_a(X)\}$ 中任选一个作为内禀态, 但显然第一种选取最合适. 因此以下都假定选椭球对称轴为内禀坐标轴, 对称轴和外部轴重合时的态作为内禀态 Φ_0, 所有其余取向的 HF 态都可由内禀态通过转动 $R(a)$ 而得到

$$\Phi_a(X)=R(a)\Phi_0(X). \tag{6-66}$$

知道了内禀群元对内禀态的作用后, 就可给出内禀群元对任一态 $\Phi_a(X)$ 的作用:

$$\bar{R}(b)\Phi_a(X)=\bar{R}(b)R(a)\Phi_0(X)=R(a)R(b)\Phi_0(X)=R(a)\Phi_b(X).$$

在 Elliott (1958) 集体转动的 SU_3 模型中, 选最高权态 $\phi((\lambda\mu)\overline{\epsilon}\overline{\Lambda}\overline{\nu})$ 为内禀态($(\lambda\mu)$ 为 SU_3 不可约表示的标志, $\bar{\epsilon}=2\lambda+\mu$, $\bar{\Lambda}=\mu/2$, $\bar{\nu}=\mu$). 其意义和这里是一样的.

现在再回过头去看(6-65)式的物理意义就非常清楚了. $\bar{R}(\alpha\beta\gamma)$ 为绕内禀轴的转动算符, $R(\alpha\beta\gamma)$为绕外部轴的转动算符, (6-65)式告诉我们, 对内禀态来说, 绕内禀轴转动的效果和绕外部轴转动的效果是一样的. 这是理所当然的, 因为我们定义内禀轴和外部轴重合时的 HF 态为内禀态.

§6.7 SO_3 群投影态

非球对称的 HF 态(以下假定为轴对称形变) 不具有确定的总角动量 J, 但具有确定的 $J_z=K$. 由(6-65)式得

$$\bar{J}_z\Phi_0^{(K)}(X)=J_z\Phi_0^{(K)}(X)=K\Phi_0^{(K)}(X). \tag{6-67}$$

即对称轴和外部轴相重合的那个 HF 态 $\Phi_0(X)$ 的角动量 z 分量就是内禀角动量的第三分量.

将投影算符 $P_M^{(J)K'}$ (6-54)式作用在内禀态 $\Phi_0^{(K)}(X)$ 上, 如果它不为零, 则得到具有确定 JM (M 为 J_z 的量子数) 的态. 现在研究这个投影态的角动量的内禀分量问题. §3.13 中已经指出, 一般说并非所有内禀群元都对组态空间波函数有确定作用, 只有某些内禀子群的类算符有确定作用. 寻找这些具有确定作用的内禀算符的方法是, 首先找出保持内禀态 $\Phi_0(X)$ 不变的所有操作, 例如, 对(6-67)式 $\Phi_0^{(K)}(X)$ 有

$$R_z'(\varphi)\Phi_0^{(K)}(X)=\Phi_0^{(K)}(X),$$

$$R_z'(\varphi)=e^{-i\varphi(J_z-K)}. \tag{6-68}$$

上式意味着内禀态$\Phi_0^{(K)}$为轴对称态. 于是由§3.13知道, 只有内禀子群的元素 $\bar{R}_z(\varphi)=e^{-i\varphi\bar{J}_z}$ 对 $\Phi_0^{(K)}$ 有确定作用. 因此内禀群 $\overline{SO_3}$ 的子群 $\overline{SO_2}$ 的 CSCO-I, 即 $\bar{J}_z$, 有确定作用.

由(6-59)式得

$$\bar{J}_z P_M^{(J)K'}\Phi_0^{(K)}(X) = (\bar{J}_z P_M^{(J)K'})\Phi_0^{(K)}(X) = K' P_M^{(J)K'}\Phi_0^{(K)}(X).$$

另一方面由 $\bar{J}_z$ 和群元 $R(a)$ 对易以及(6-67)式得

$$\bar{J}_z P_M^{(J)K'}\Phi_0^{(K)}(X) = P_M^{(J)K'}\bar{J}_z\Phi_0^{(K)}(X) = K P_M^{(J)K'}\Phi_0^{(K)}(X).$$

比较前面二式，得到

$$P_M^{(J)K'}\Phi_0^{(K)}(X) = \delta_{KK'}\Psi_M^{(J)K}(X), \tag{6-69}$$

$$\Psi_M^{(J)K}(X) = \frac{2J+1}{8\pi^2}\int D_{MK}^{(J)*}(\alpha\beta\gamma)R(\alpha\beta\gamma)\Phi_0^{(K)}(X)\sin\beta\, d\alpha\, d\beta\, d\gamma. \tag{6-70}$$

(6-69) 式表明总角动量沿内禀三轴的分量 K 完全由内禀态的角动量 z 分量决定．这正好就是大家熟知的一个事实的数学表述，即对轴对称形变核（这里轴对称要求反映在 (6-68) 式）原子核绕对称轴没有集体转动 (Bohr 和 Mottlson (1975))，因为我们无法区分二个内禀坐标系，它们的差别仅仅是绕对称轴转过某一角度.

综上所述，投影态 $\Psi_M^{(J)K}$ 满足联立本征方程

$$\begin{pmatrix} J^2 \\ J_z \\ \bar{J}_z \end{pmatrix}\Psi_M^{(J)K}(X) = \begin{pmatrix} J(J+1) \\ M \\ K \end{pmatrix}\Psi_M^{(J)K}(X). \tag{6-71}$$

Elliott SU_3 模型中所选的内禀态

$$\Phi((\lambda\mu)\bar{\epsilon}\bar{\Lambda}\bar{\nu}),\ \bar{\epsilon}=2\lambda+\mu,\ \bar{\Lambda}=\mu/2,\ \bar{\nu}=\mu,$$

不具有确定的 J_z 值，J_z 取值范围为 $K=\mu,\ \mu-2,\ \cdots 1$，或 0．我们可同样用投影算符投影出具有确定 $J,\ M,\ K$ 的成分

$$\Psi_M^{(J)K} = P_M^{(J)K}\phi((\lambda\mu)\bar{\epsilon}\bar{\Lambda}\bar{\nu}),\quad K=\mu,\ \mu-2,\cdots,1 \text{ 或 } 0. \tag{6-72}$$

内禀量子数 K 用来区分相同 JM 的态．不同的 K 代表不同的内禀激发态，同一 K 不同的 J 构成一个转动带，因此内禀量子数 K 可用来标志转动带(Elliott, Arima 和 Iachello).

还要强调指出一点，投影态(6-70)式相对于量子数 JM 是正交的，但对内禀量子数 K 显然不正交，由(5-245b)式、(5-245c)式得到

$$\langle\Psi_{M'}^{(J')K'}|\Psi_M^{(J)K}\rangle = \langle\Phi_0|P_{K'}^{(J')M'}P_M^{(J)K'}|\Phi_0\rangle = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}\langle\Phi_0|P_{K'}^{(J)K}|\Phi_0\rangle. \tag{6-73}$$

§6.8 SO_3 和 $\overline{SO}_3$ 群不可约张量

1. SO_3 和 $\overline{SO}_3$ 群伴随表示的不可约张量

SO_3 群的无穷小算符 $J_x,\ J_y,\ J_z$ 构成 SO_3 群伴随表示 $J=1$ 的不可约基．§5.16 已经讲过，当给定不可约矩阵 $D_{mK}^{J}(\alpha\beta\gamma)$（(6.48)式的解），即限定为 $SO_3\supset SO_2$ 分类后，只有把 $J_x,\ J_y,\ J_z$ 适当线性组合，才能把它们组合成 SO_2 群伴随表示的不可约张量 $T_\rho^{(1)}=J_\rho,\ \rho=1,\ 0,\ -1$,

$$J_1 \doteq -\sqrt{\frac{1}{2}}(J_x+iJ_y),\quad J_0=J_z,\quad J_{-1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(J_x-iJ_y). \tag{6-74}$$

类似地，$\overline{SO}_3$ 群的伴随表示不可约张量 $\bar{T}_\rho^{(1)}=\bar{J}_\rho\ (\rho=1,\ 0,\ -1)$ 为

$$\bar{J}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{J}_x+i\bar{J}_y),\quad \bar{J}_0=\bar{J}_z,\quad \bar{J}_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\bar{J}_x-i\bar{J}_y). \tag{6-75}$$

由(5-228)式得

$$\bar{J}_\rho=\sum_\sigma D^{(1)}_{\sigma\rho}(\alpha\beta\gamma)J_\sigma,\quad J_\sigma=\sum_\rho D^{(1)*}_{\sigma\rho}(\alpha\beta\gamma)\bar{J}_\rho. \tag{6-76}$$

$D^{(1)}$ 为 $j=1$ 的不可约矩阵，表达式见文献[18]．由(5-264)式得到 J_ρ 和 $\bar{J}_\rho$ 矩阵元之间的关系

$$\langle jm'|J_\rho|jm\rangle=\langle jm|\bar{J}_\rho|jm'\rangle. \tag{6-77}$$

由角动量理论及上式得

$$\langle jm|J_z|jm\rangle=\langle jm|\bar{J}_z|jm\rangle=m, \tag{6-78a}$$

$$\langle jm\pm1|J_x\pm iJ_y|jm\rangle=\langle jm|\bar{J}_x\pm i\bar{J}_y|jm\pm1\rangle=[(j\mp m)(j\pm m+1)]^{1/2}. \tag{6-78b}$$

再次指出，(6-78a) 式并不意味着 $\bar{J}_z=J_z$，(6-78b) 式并不意味着 $(\bar{J}_x\pm i\bar{J}_y)=(J_x\pm iJ_y)^\dagger$．把上式写得更明确一些就可看清这一点．

$$\langle\psi^{(j)}_m|J_z|\psi^{(j)}_m\rangle=\langle\psi^{(j)m}|\bar{J}_z|\psi^{(j)m}\rangle, \tag{6-79a}$$

$$\langle\psi^{(j)}_{m\pm1}|J_x\pm iJ_y|\psi^{(j)}_m\rangle=\langle\psi^{(j)m}|\bar{J}_x\pm i\bar{J}_y|\psi^{(j)m\pm1}\rangle. \tag{6-79b}$$

这里 $\psi^{(j)}_m$ 为 $SO_3\supset SO_2$ 不可约基，而 $\psi^{(j)m}$ 为 $\overline{SO_3}\supset\overline{SO_2}$ 不可约基．因此(6-78b)式仅仅告诉我们 $\bar{J}_x\pm i\bar{J}_y$ 的矩阵元数值上等于 $J_x\mp iJ_y$ 的矩阵元．

2．一般情形下的不可约张量

SO_3 群是简单可约群，因此(5-261)式中的指标 θ 是多余的，角动量 J 的约化矩阵元为(Rose)

$$\langle j\|J\|j\rangle=\sqrt{j(j+1)}. \tag{6-80}$$

由(5-250)式、(5-253)式、(5-261)式和(6-80)式得到 SO_3 和 $\overline{SO_3}$ 群不可约张量的定义式

$$[J_\rho,\ T^{(\nu)}_m]=\sum_l D^{(\nu)}_{lm}(J_\rho)T^{(\nu)}_l=\sqrt{\nu(\nu+1)}C^{\nu m+\rho}_{\nu m,1\rho}T^{(\nu)}_{m+\rho}, \tag{6-81a}$$

$$[\bar{J}_\rho,\ \bar{T}^{(\nu)}_M]=-\sum_l D^{(\nu)}_{lm}(J_\rho)\bar{T}^{(\nu)}_l=-\sqrt{\nu(\nu+1)}C^{\nu m+\rho}_{\nu m,1\rho}\bar{T}^{(\nu)}_{m+\rho}. \tag{6-81b}$$

这里 ν 代表角动量而不是代表 CSCO-I J^2 的本征值．由上式得

$$[J_\rho,\ J_\sigma]=-\sqrt{2}\,C^{1,\rho+\sigma}_{1\rho,1\sigma}J_{\rho+\sigma}, \tag{6-82a}$$

$$[\bar{J}_\rho,\ \bar{J}_\sigma]=\sqrt{2}\,C^{1,\rho+\sigma}_{1\rho,1\sigma}\bar{J}_{\rho+\sigma}. \tag{6-82b}$$

利用 CG 系数的代数表达式(Rose)，由(6-81)式得

$$[J_z,\ T^{(\nu)}_m]=mT^{(\nu)}_m,\quad [\bar{J}_z,\ \bar{T}^{(\nu)}_m]=-m\bar{T}^{(\nu)}_m,$$

$$[J_x\pm iJ_y,\ T^{(\nu)}_m]=[(\nu\mp m)(\nu\pm m+1)]^{1/2}T^{(\nu)}_{m\pm1},$$

$$[\bar{J}_x\pm i\bar{J}_y,\ \bar{T}^{(\nu)}_m]=-[(\nu\mp m)(\nu\pm m+1)]^{1/2}\bar{T}^{(\nu)}_{m\pm1}. \tag{6-83}$$

由(5-262)式、(5-263)式得

$$[J_\rho,\ D^{(j)}_{mk}(\alpha\beta\gamma)]=-\sqrt{j(j+1)}C^{jm}_{jm-\rho,1\rho}D^{(j)}_{m-\rho,k}(\alpha\beta\gamma), \tag{6-84a}$$

$$[\bar{J}_\rho,\ D^{(j)}_{mk}(\alpha\beta\gamma)]=-\sqrt{j(j+1)}C^{jk+\rho}_{jk,1\rho}D^{(j)}_{m,k+\rho}(\alpha\beta\gamma), \tag{6-84b}$$

$$[J_\rho,\ D^{(j)*}_{mk}(\alpha\beta\gamma)]=\sqrt{j(j+1)}C^{jm+\rho}_{jm,1\rho}D^{(j)*}_{m+\rho,k}(\alpha\beta\gamma), \tag{6-85a}$$

$$[\bar{J}_\rho,\ D^{(j)*}_{mk}(\alpha\beta\gamma)]=\sqrt{j(j+1)}C^{jk}_{jk-\rho,1\rho}D^{(j)*}_{m,k-\rho}(\alpha\beta\gamma). \tag{6-85b}$$

比较(6-81)式和(6-84)、(6-85)式，可看到

$$D^{(j)*}_{mk}(\alpha\beta\gamma)=T^{(j)}_m,\quad D^{(j)}_{mk}(\alpha\beta\gamma)=\bar{T}^{(j)}_k. \tag{6-86}$$

下面我们讨论一下按(6-81b)式定义的内禀群 $\overline{SO_3}$ 的不可约张量 $\bar{T}^{(\nu)}_m$ 的物理意义．

如果 SO_3 群不可约张量 $T^{(\nu)}_m$ 相对于绕内禀轴转动 $\bar{R}(\alpha\beta\gamma)$ 是个标量，即

$$[\bar{J}_\rho,\ T^{(\nu)}_m]=0, \tag{6-87}$$

则它在内禀坐标系上的分量 $T'^{(\nu)}_m$ 就是内禀群不可约张量 $\bar{T}^{(\nu)}_m$．$T'^{(\nu)}_m$ 和 $T^{(\nu)}_m$ 的关系为

$$T_m^{\prime\prime(\nu)}=\sum_{m'}D_{m',m}^{(\nu)}(\alpha\beta\gamma)T_{m'}^{(\nu)}. \tag{6-88}$$

利用(6-87)式、(6-84b)式、(6-81)式立刻可证明这一点.

物理上一些重要的算符确实满足条件(6-87)式. 例如角动量算符 $T_\rho^{(1)}=J_\rho$ 和多极算符

$$T_\mu^{(\lambda)}=\sum_{i=1}^{A}r_i^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta_i\varphi_i). \tag{6-89}$$

相应的内禀群 $\overline{SO_3}$ 的不可约张量为

$$J'_\rho=\bar{J}_\rho,$$

$$T_\mu^{\prime\prime(\lambda)}=\bar{T}_\mu^{(\lambda)}=\sum_{i=1}^{A}r_i'^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta_i'\varphi_i'). \tag{6-90}$$

这里 $r_i\theta_i\varphi_i(r_i'\theta_i'\varphi_i')$ 为第 i 个粒子在外部(内禀)坐标系中的坐标.

值得注意的是,一般说来,按(6-88)式定义的 $T_m^{\prime\prime(\nu)}$ 不一定就是内禀群的不可约张量 $\bar{T}_m^{(\nu)}$,因为 $T_m^{\prime\prime(\nu)}$ 在内禀转动下的变换性质 $[\bar{J}_\rho, T_m^{\prime\prime(\nu)}]$ 还和 $T_m^{(\nu)}$ 在内禀转动下的变换性质 $[\bar{J}_\rho, T_m^{(\nu)}]$ 有关,而 $[\bar{J}_\rho, T_m^{\prime\prime(\nu)}]$ 和 $[\bar{J}_\rho, T_m^{(\nu)}]$ 之间没有什么必然的联系. 例如若 $T_m^{(\nu)}=D_{mk_0}^{(\nu)*}(\alpha\beta\gamma)$, k_0 取某一确定值. 由(6-88)式看到

$$T_m^{\prime\prime(\nu)}=\delta_{m,k_0}$$

为一常数, 因此无论相对于外部转动或内禀转动, 它都是一个标量, 而不是内禀群不可约张量 $\bar{T}_m^{(\nu)}$.

从本章讨论看到, 内禀群 $\overline{SO_3}$ 为原子核绕内禀轴转动提供了一个恰当的数学描述. 原来一些使人迷惑的地方现在变得容易理解了. Bohr 书(1969)上附录 IA-b 给出的那些关系式在这里作为前一章一般情形的一个特例很容易地导出来了.

第七章 酉 群

酉群在物理上有着广泛的应用. 它的应用主要有两个方面: (1) 酉群为一系统的哈密顿量的对称群或近似对称群, 这时如果没有偶然简并, 则哈密顿的本征函数荷载酉群的一个不可约表示(ν), 我们可用(ν)来标志系统的状态. 例如核力和电荷无关, 因此若忽略质子之间的库仑力, 则原子核的哈密顿具有 SU_2 对称性, 核能级可用 SU_2 群的 IR 标志——同位旋 T 来表征. 又如各向同性三维谐振子壳模型具有 SU_3 对称性; 基本粒子中强相互作用在色空间有 SU_3 对称等. (2) 当酉群不是哈密顿量的对称群时, 这时引入酉群是为了利用酉群及其子群来规定一套完备基, 以便将哈密顿对角化. 例如对 l 轨道, 引入 SU_{2l+1} 群; 对 j 壳层引入 SU_{2j+1} 群; 对自旋同位旋空间引进 SU_4 群等等.

物理上一般都用 SU_n 群, 但讨论问题时, 有时却用 U_n 群更为方便. U_n 群虽然不是半纯群, 但半纯群的理论仍可用于 U_n 群 (Moshinsky, 1963).

本章只讨论普通的酉群, 关于阶化酉群或超酉群的问题见 Chen, Chen 和 Gao (1983).

§7.1 坐标空间和态空间的酉群

设有 f 个粒子, 坐标编码为 1, 2, …, f, n 个单粒子态 $m_1, m_2, \cdots, m_n$ (或 $\alpha, \beta, \gamma, \cdots, \delta$). 以下用 a_j 代表任一个坐标编码, 即 a_j 可以等于 1, 2, …, f 中的任意一个, 用 i_j(如 $i_1, i_2, \cdots$) 代表任一个单粒子态, 即 i_j 可以等于 $m_1, m_2, \cdots, m_n$ 中的任意一个. n 个单粒子态 φ_m 构成态空间酉群 $\mathscr{U}_n(S\mathscr{U}_n)$ 的基本表示, 在群元 $\mathscr{R}(b)$ 作用下有:

$$\mathscr{R}(b)\varphi_{m_i}=\sum_{j=1}^{n}\mathscr{D}_{ji}(b)\varphi_{m_j}=\sum_{j=1}^{n}R_{ij}\varphi_{m_j} \tag{7-1}$$

式中 b 代表群参数, $\mathscr{D}(b)$ 为 $n\times n$ 幺正矩阵. 由上式看到 $\mathscr{D}$ 和 (5-80a) 式中 R 的关系为 $\mathscr{D}_{ji}=R_{ij}$. φ_m 为一级张量. 由 §5.4 知 $\mathscr{R}(b)$ 可写成

$$\mathscr{R}(b)=\exp[-i\sum_{\alpha\beta}b_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}], \tag{7-2a}$$

$$e_{\alpha\beta}=c_{\alpha}^{\dagger}c_{\beta}. \tag{7-2b}$$

$e_{\alpha\beta}$ 为作用在单粒子态时酉群的无穷小生成元, 它作用于单粒子态 γ 上, 当 $\beta\neq\gamma$ 时, 结果为零, 当 $\beta=\gamma$ 时, 它把 $\gamma(=\beta)$ 态变到 α 态

$$e_{\alpha\beta}\varphi_{\gamma}=\delta_{\beta\gamma}\varphi_{\alpha}. \tag{7-3a}$$

因此

$$e_{\alpha\beta}e_{\gamma\delta}=\delta_{\beta\gamma}e_{\alpha\delta}. \tag{7-3b}$$

若有 f 个粒子, 其乘积态(共有 n^f 个这种态)

$$|i_1i_2\cdots i_f\rangle=\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_f}^{a_f},\quad i_1,\ i_2,\ \cdots,\ i_f=m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_n. \tag{7-4}$$

酉群群元 $\mathscr{R}(b)$ 对乘积态 (7-4) 式的作用定义为对每个粒子 a_j 都进行同样的酉变换

$$\begin{aligned}\mathscr{R}(b)|i_1i_2\cdots i_f\rangle&=(\mathscr{R}^{(a_1)}(b)\varphi_{i_1}^{a_1})(\mathscr{R}^{(a_2)}(b)\varphi_{i_2}^{a_2})\cdots(\mathscr{R}^{(a_f)}(b)\varphi_{i_f}^{a_f})\\&=\sum_{i_1'i_2'\cdots i_f'}\mathscr{D}_{i_1'i_1}(b)\mathscr{D}_{i_2'i_2}(b)\cdots\mathscr{D}_{i_f'i_f}(b)|i_1'i_2'\cdots i_f'\rangle.\end{aligned} \tag{7-5}$$

因此 n^f 个乘积态(7-4)式在酉变换下是一个 n 维 f 秩(rank)张量，它们构成 $\mathscr{U}_n$ 群和 S_f 群的一个可约表示. $\mathscr{R}^{(a_i)}(b)$ 可写成

$$\mathscr{R}^{(a_i)}(b)=\exp[-i\sum_{\alpha\beta}b_{\alpha\beta}e_{\alpha\beta}^{(a_i)}], \tag{7-6a}$$

$$e_{\alpha\beta}^{(a_i)}=c_\alpha^\dagger(a_i)c_\beta(a_i). \tag{7-6b}$$

式中 $c_\alpha^\dagger(a_i)$ ($c_\beta(a_i)$)为第 a_i 个粒子的产生(消灭)算符

$$c_\alpha^\dagger(a_i)|0\rangle=\varphi_\alpha^{a_i}, \tag{7-7a}$$

$$e_{\alpha\beta}^{(a_i)}\varphi_\gamma^{(a_j)}=\delta_{ij}\delta_{\beta\gamma}\varphi_\alpha^{(a_i)}. \tag{7-7b}$$

由于 a_i 不同的 $e_{\alpha\beta}^{(a_i)}$ 之间互相对易，所以

$$[e_{\alpha\beta}^{(a_i)},\ e_{\gamma\delta}^{(a_j)}]=\delta_{ij}(\delta_{\beta\gamma}e_{\alpha\delta}^{(a_i)}-\delta_{\alpha\delta}e_{\gamma\beta}^{(a_i)}). \tag{7-7c}$$

由(7-5)式和(7-6)式得到作用在多粒子态时酉群元素的表达式

$$\mathscr{R}(b)=\prod_{i=1}^{f}\mathscr{R}^{(a_i)}(b)=\exp(-i\sum_{\alpha\beta}b_{\alpha\beta}\mathscr{E}_{\alpha\beta}), \tag{7-8a}$$

$$\mathscr{E}_{\alpha\beta}=\sum_{i=1}^{f}e_{\alpha\beta}^{(a_i)}. \tag{7-8b}$$

$\mathscr{E}_{\alpha\beta}$ 为作用在多粒子态时酉群的无穷小生成元. 由(7-7c)式容易证明

$$[\mathscr{E}_{\alpha\beta},\ \mathscr{E}_{\gamma\delta}]=\delta_{\beta\gamma}\mathscr{E}_{\alpha\delta}-\delta_{\alpha\delta}\mathscr{E}_{\gamma\beta}, \tag{7-9}$$

和(5-51)式一致，但(7-3b)式不再成立，即 $\mathscr{E}_{\alpha\beta}\mathscr{E}_{\gamma\delta}\neq\delta_{\beta\gamma}\mathscr{E}_{\alpha\delta}$，因为这里出现了诸如 $e_{\alpha\beta}^{(a_i)}e_{\gamma\delta}^{(a_j)}$ ($i\neq j$)的项.

令群参数 $b_{\alpha\beta}=\epsilon$ 为无穷小量，其余参数 $b_{\alpha'\beta'}=0(\alpha'\neq\alpha,\ \beta'\neq\beta)$，由(7-8)式和(7-7b)式得到 $\mathscr{E}_{\alpha\beta}$ 对多粒子态的作用为[1)]

$$\mathscr{E}_{\alpha\beta}(\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_f}^{a_f})=\delta_{i_1\beta}\varphi_\alpha^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_f}^{a_f}+\delta_{i_2\beta}\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_\alpha^{a_2}\cdots\varphi_{i_f}^{a_f}+\cdots+\delta_{i_f\beta}\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_\alpha^{a_f}, \tag{7-10}$$

上式中若某些 a_i 相等仍成立.

$\mathscr{E}_{\alpha\alpha}$ 为 α 态的粒子数算符

$$\hat{n}_\alpha=\mathscr{E}_{\alpha\alpha}=\sum_{i=1}^{f}c_\alpha^\dagger(a_i)c_\alpha(a_i). \tag{7-11}$$

类似地可定义坐标空间酉群 U_n 或幺模酉群 SU_n. n 个单粒子态 $\varphi_m^{a_i}(i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$ 构成 U_n 群基本表示的基，在 U_n 群元作用下有

$$R(b)\varphi_m^{a_i}=\sum_{j=1}^{n}\mathscr{D}_{ji}(b)\varphi_m^{a_j}. \tag{7-12}$$

U_n 群无穷小算符为

$$E_{a_1a_2}=\sum_{\alpha=1}^{n}e_{a_1a_2}^{(\alpha)}, \tag{7-13}$$

$$e_{a_1a_2}^{(\alpha)}=c_\alpha^\dagger(a_1)c_\alpha(a_2). \tag{7-14}$$

$e_{a_1a_2}^{(\alpha)}$ 把第 α 态的粒子坐标 a_2 变成坐标 a_1，如果 α 态的粒子坐标不是 a_2，则作用结果为零，即

$$e_{a_1a_2}^{(\alpha)}\varphi_\beta^{a_3}=\delta_{\alpha\beta}\delta_{a_2a_3}\varphi_\alpha^{a_1}. \tag{7-15}$$

类似于(7-7c)式、(7-9)式和(7-10)式，有

$$[e_{ab}^{(\alpha)},\ e_{cd}^{(\beta)}]=\delta_{\alpha\beta}(\delta_{bc}e_{ad}^{(\alpha)}-\delta_{ad}e_{cb}^{(\alpha)}). \tag{7-16}$$

$$[E_{ab},\ E_{cd}]=\delta_{bc}E_{ad}-\delta_{ad}E_{cb}. \tag{7-17}$$

$$E_{ab}(\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_n}^{a_n})=\delta_{a_1b}\varphi_{i_1}^{a}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_n}^{a_n}+\delta_{a_2b}\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a}\cdots\varphi_{i_n}^{a_n}+\cdots+\delta_{a_nb}\varphi_{i_1}^{a_1}\varphi_{i_2}^{a_2}\cdots\varphi_{i_n}^{a}. \tag{7-18}$$

---

1) 将指数函数展开，并略去高次无穷小量.

和第四章一样，这里还可以定义坐标置换群 S_f 和态置换群 $\mathscr{S}_f$，前者置换(7-4)式中 a 的下标，后者置换 i 的下标．显而易见，属于不同空间的两个群互相对易，

$$\begin{aligned}&[S_f,\ \mathscr{S}_f]=0,\quad [U_n,\ \mathscr{U}_n]=0,\\&[S_f,\ \mathscr{U}_n]=0,\quad [\mathscr{S}_f,\ U_n]=0.\end{aligned}\tag{7-19}$$

但属于同一个空间的两个群之间不对易

$$[S_f,\ U_n]\neq 0,\quad [\mathscr{S}_f,\ \mathscr{U}_n]\neq 0.\tag{7-20}$$

现以 $\mathscr{S}_f$ 和 $\mathscr{U}_n$ 群为例来说明之．在 f 个单粒子态 $i_1,\ i_2,\ \cdots,\ i_f$ 全不相同的乘积态(7-4)式上，$\mathscr{S}_f$ 群的置换算符 $\mathscr{P}$ 有明确的定义，但经过 $\mathscr{U}_n$ 群元作用后，粒子态变了，可能出现相同的粒子态．这时单个置换算符 $\mathscr{P}$ 已没有确定意义，只有类算符才有意义，当然谈不上 $\mathscr{S}_f$ 和 $\mathscr{U}_n$ 对易了．S_f 和 U_n 的情形与此类似．

§7.2 酉群和置换群的CSCO-I及生成元之间的关系

1. Gelfand 不变量

Gelfand (1950) 定义了 n 个算符

$$\mathscr{I}_k^{(n)}=\sum_{i_1i_2\cdots i_k}^{n}\mathscr{E}_{i_1i_2}\mathscr{E}_{i_2i_3}\cdots\mathscr{E}_{i_ki_1},\quad k=n,\ n-1,\ \cdots,\ 1.\tag{7-21}$$

可以证明 $\mathscr{I}_k^{(n)}$ 满足条件(5-219)式，即

$$[\mathscr{E}_{ij},\ \mathscr{I}_k^{(n)}]=0,\quad i,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ n.\tag{7-22}$$

因此 $\{\mathscr{I}_k^{(n)}\}$ 为 $\mathscr{U}_n$ 群的不变算符集．$\mathscr{I}_1^{(n)}$ 为粒子数算符

$$\mathscr{I}_1^{(n)}=\sum_{i=1}^{n}\mathscr{E}_{ii}=f.\tag{7-23}$$

Gelfand 证明了 n 个不变算符 $\{\mathscr{I}_k^{(n)}\}$ 的本征值唯一标志 $\mathscr{U}_n$ 群的一个 IR，因此 $\{\mathscr{I}_k^{(n)}\}$ 为 $\mathscr{U}_n$ 群的 CSCO-I．

由(5-124)式知道，$S\mathscr{U}_n$ 群的无穷小算符为

$$\mathscr{E}'_{ij}=\mathscr{E}_{ij}-\delta_{ij}\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\mathscr{E}_{kk}.\tag{7-24}$$

$S\mathscr{U}_n$ 群的 CSCO-I 由 $n-1$ 个不变算符所组成

$$\mathscr{I}_k^{\prime(n)}=\sum_{i_1i_2\cdots i_k}^{n}\mathscr{E}'_{i_1i_2}\mathscr{E}'_{i_2i_3}\cdots\mathscr{E}'_{i_ki_1},\quad k=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2.\tag{7-25a}$$

$\mathscr{I}_k^{\prime(n)}$ 可用 $\mathscr{I}_k^{(n)}$ 等表示出来，例如由(7-24)式可得

$$\mathscr{I}_1^{\prime(n)}=0,\qquad \mathscr{I}_2^{\prime(n)}=\mathscr{I}_2^{(n)}-\frac{1}{n}\Big(\sum_i^n\mathscr{E}_{ii}\Big)^2=\mathscr{I}_2^{(n)}-\frac{f^2}{n}.\tag{7-25b}$$

上述关系对坐标空间酉群 U_n 或 SU_n 群也完全适用，只要将草体算符改成正体算符即可．Biedenharn (1963) 也讨论了 SU_n 群不变算符集的构造方法．

由于 $S\mathscr{U}_n$ 和 $\mathscr{U}_n$ 群的 CSCO-I 有上述关系，因此若 $\psi^{(\nu)}$ 为 $\mathscr{U}_n$ 群 CSCO-I 的本征函数，则也必定是 $S\mathscr{U}_n$ 群的 CSCO-I 的本征函数．换言之，若 $\psi^{(\nu)}$ 属于 $\mathscr{U}_n$ 群某一 $IR(\nu)$，则也必定属于 $S\mathscr{U}_n$ 群的某一 $IR(\nu)$．下面我们来证明 $\mathscr{U}_n$ 群的不可约表示相对于其子群 $S\mathscr{U}_n$ 群来说，仍为不可约．

由(7-5)式可知，如果以 f 秩张量(7-4)式的线性组合作为 $\mathscr{U}_n$ 群的不可约基，则 $\mathscr{U}_n$ 群的不可约矩阵 $D^{(\nu)}(\mathscr{R})$ 的元素为酉变换矩阵元 R_{ij}（即 $\mathscr{D}_{ji}$）的阶数为 f 的齐次多项式，

$$D^{(\nu)}(\mathscr{R})=F^{(\nu)}(R_{ij}). \tag{7-26a}$$

利用标度变换

$$R_{ij}=(\det R)^{1/n}R'_{ij} \tag{7-26b}$$

可使幺正变换 $\{R_{ij}\}$ 变成幺模幺正变换 $\{R'_{ij}\}$. 由(7-26a)式和(7-26b)式可知 $\mathscr{U}_n$ 群和 $S\mathscr{U}_n$ 群的不可约表示矩阵有以下的关系：

$$D^{(\nu)}(\mathscr{U}_n)=(\det R)^{f/n}D^{(\nu)}(S\mathscr{U}_n). \tag{7-26c}$$

由此可知 $\mathscr{U}_n$ 群的不可约表示相对于 $S\mathscr{U}_n$ 群必定为不可约.

2. 酉群和置换群 CSCO-I 的关系

Partensky 定义了算符

$$P_k^{a_1a_2\cdots a_k}=\frac{1}{k!}\sum_{i_1i_2\cdots i_k}^{n}(e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_3}^{(a_2)}\cdots e_{i_ki_1}^{(a_k)})_s. \tag{7-27}$$

等式中 s 代表将坐标编码 $a_1, a_2, \cdots, a_k$ 对称化. 现在证明 $P_k^{a_1a_2\cdots a_k}$ 作用在 $\varphi_{m_1}^{a_1}\varphi_{m_2}^{a_2}\cdots\varphi_{m_k}^{a_k}$ 上等价于 S_k 群的 k 循环平均类算符 $C^{(k)}(k)$

$$P_k^{a_1a_2\cdots a_k}=C^{(k)}(k)=\frac{1}{(k-1)!}C_{(k)}(k), \tag{7-28}$$

式中 $(k-1)!$ 为 S_k 群的 k 循环类算符中所包含的置换算符个数[(1-23)式]. 由(7-15)式得

$$\sum_{i_1i_2}^{n}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_2)}\varphi_{m_1}^{(a_1)}\varphi_{m_2}^{(a_2)}=\sum_{i_1i_2}^{n}\delta_{i_2m_1}\delta_{i_1m_2}\varphi_{i_1}^{(a_1)}\varphi_{i_2}^{(a_2)}=\varphi_{m_2}^{(a_1)}\varphi_{m_1}^{(a_2)}$$

$$\therefore\quad \sum_{i_1i_2}^{n}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_2)}=(a_1a_2). \tag{7-29a}$$

容易推广证明

$$\sum_{i_1i_2\cdots i_k}^{n}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_3}^{(a_2)}\cdots e_{i_ki_1}^{(a_k)}=(a_1a_2\cdots a_k). \tag{7-29b}$$

将上式对称化就给出(7-28)式. 例如:

$$P_3^{a_1a_2a_3}=\frac{1}{2}C_{(3)}(3)=\frac{1}{2}[(123)+(132)].$$

Partensky 定义了另一个算符:

$$P_k^f=\binom{f}{k}^{-1}\sum_{a_1>\cdots>a_k}^{f}P_k^{a_1a_2\cdots a_k}=\left[\binom{f}{k}(k-1)!\right]^{-1}C_{(k)}(f)=\frac{1}{g_{(k)}}C_{(k)}(f), \tag{7-30}$$

$$g_{(k)}=\binom{f}{k}(k-1)!.$$

(7-30) 式中 $C_{(k)}(f)$ 为 S_f 群的 k 循环类算符, $g_{(k)}$ 为 $C_{(k)}(f)$ 类中包含的置换算符的数目[(1-23)式]. 例如

$$P_3^4=\frac{1}{4}[P_3^{a_1a_2a_3}+P_3^{a_1a_2a_4}+P_3^{a_1a_3a_4}+P_3^{a_2a_3a_4}]$$

$$=\frac{1}{8}[(123)+(132)+(124)+(142)+(134)+(143)+(234)+(243)].$$

现在来导出 P_k^f 和 $\mathscr{U}_n$ 群不变算符的关系. 由(7-30)式、(7-27)式和(7-21)式得:

$$P_2^f=\frac{2}{f(f-1)}\sum_{i_1i_2}^{n}\sum_{a_1>a_2}^{f}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_2)}=\frac{1}{f(f-1)}\sum_{i_1i_2}^{n}\left[\sum_{a_1a_2}^{f}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_2)}-\sum_{a_1}^{f}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_1)}\right]$$

$$=\frac{1}{f(f-1)}\left[\mathscr{I}_2^{(n)}-n\sum_{i_1}^{n}\sum_{a_1}^{f}e_{i_1i_1}^{(a_1)}\right]=\frac{1}{f(f-1)}[\mathscr{I}_2^{(n)}-nf]. \tag{7-31}$$

引入函数

$$F^{(n)}=\prod_{j>i=1}^{n}(1-\delta_{c_j a_j}).\tag{7-32a}$$

例如

$$F^{(3)}=1-(\delta_{a_1a_2}+\delta_{a_1a_3}+\delta_{a_2a_3})+2\delta_{a_1a_2}\delta_{a_1a_3}.\tag{7-32b}$$

由(7-30)式、(7-27)式、(7-32)式、(7-3b)式和(7-21)式得:

$$\begin{aligned}P_3^f&=\frac{1}{f(f-1)(f-2)}\sum_{i_1i_2i_3}^{n}\sum_{a_1>a_2>a_3}^{f}(e_{i_1i_2}^{a_1}e_{i_2i_3}^{a_2}e_{i_3i_1}^{a_3})\\&=\frac{1}{f(f-1)(f-2)}\sum_{i_1i_2i_3}^{n}\sum_{a_1a_2a_3}^{f}e_{i_1i_2}^{a_1}e_{i_2i_3}^{a_2}e_{i_3i_1}^{a_3}F^{(3)}\\&=[\mathscr{I}_3^{(n)}-2n\mathscr{I}_2^{(n)}+(n^2+1)f-f^2]/[f(f-1)(f-2)].\end{aligned}\tag{7-33}$$

这里利用了关系式 $\sum_{i_1}^{n}\sum_{a_1}^{f}e_{i_1i_1}^{(a_1)}=\sum_{i_1}^{n}n_{i_1}=f$. n_{i_1} 为处于 i_1 态的粒子数[(7-11)式].

由(7-30)式、(7-31)式和(7-33)式得

$$\begin{aligned}&\mathscr{I}_2^{(n)}=2C_{(2)}(f)+nf,\\&\mathscr{I}_3^{(n)}=3C_{(3)}(f)+4nC_{(2)}(f)+(n^2-1)f+f^2.\end{aligned}\tag{7-34}$$

类似地可证明 $\mathscr{I}_k^{(n)}$ 为 S_f 群的类算符 $C_{(k)}(f)\cdots C_{(2)}(f)$ 的函数，即

$$\mathscr{I}_k^{(n)}=F_k^{(n)}(C_{(k)}(f),\ C_{(k-1)}(f),\ \cdots,\ C_{(2)}(f)).\tag{7-35}$$

§3.2 中已讲过，S_f 群的所有类算符都可用 S_f 群的 CSCO-I 即 $C(f)$[1] 表示出来，因此 $\mathscr{I}_k^{(n)}$ 为 $C(f)=\mathscr{C}(f)$ 的函数

$$\mathscr{I}_k^{(n)}=F_k^{(n)}(C(f))=F_k^{(n)}(\mathscr{C}(f)).\tag{7-36}$$

这里 $\mathscr{C}(f)$ 为态空间置换群 $\mathscr{S}_f$ 的 CSCO-I.

类似地可以证明 U_n 群的不变算符 $I_k^{(n)}$ 和 $\mathscr{S}_f$ 群的 CSCO-I 的关系为 $I_k^{(n)}=F_k^{(n)}(\mathscr{C}(f))$. 结合(7-36)式得到一个重要关系:

$$I_k^{(n)}=\mathscr{I}_k^{(n)}=F_k^{(n)}(C(f))=F_k^{(n)}(\mathscr{C}(f)).\tag{7-37}$$

即 U_n, $\mathscr{U}_n$, S_f 和 $\mathscr{S}_f$ 四个群的 CSCO-I——$\{I_k^{(n)}\}$, $\{\mathscr{I}_k^{(n)}\}$, $C(f)$ 和 $\mathscr{C}(f)$——中，只有一个是独立的. 因此任一种 CSCO 的本征函数也必定是其余三种 CSCO 的本征函数. 于是我们可用同一个指标 ν 标志这四个群的不可约表示，据此我们有

定理: 若 $\psi^{(\nu)}$ 属于四个群 U_n, $\mathscr{U}_n$, S_f 和 $\mathscr{S}_f$ 中任一个群的 $IR(\nu)$，则它必属于其余三个群的同一 $IR(\nu)$.

标志这四个群的不可约表示可有多种方法，最常见的是用配分

$$[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots]=[m_{in}]\equiv[m_{1n}m_{2n}\cdots m_{nn}].$$

当然也可用 $C(f)$ 或 $I_k^{(n)}$ 的本征值. Partensky 证明了 $I_k^{(n)}$ 的本征值(仍用 $I_k^{(n)}$ 表示)和配分有以下关系

$$I_k^{(n)}=\sum_{i=1}^{n}m_{in}f_k^{(n)}(i).\tag{7-38a}$$

式中 $f_k^{(n)}(i)$ 由以下递推公式决定

$$\begin{aligned}&f_{k+1}^{(n)}(i)=q_{in}f_k^{(n)}(i)-\sum_{j=1}^{i-1}f_k^{(n)}(j),\\&q_{in}=m_{in}+n-i,\quad f_1^{(n)}(i)\equiv1.\end{aligned}\tag{7-38b}$$

例如

1) 本章中 $C(f)$ 代表 S_f 群 CSCO-I，而 $C_{(k)}(f)$ 为 k 循环类算符.

$$I_1^{(n)}=f,\ I_2^{(n)}=\sum_{i=1}^{n}m_{in}(m_{in}-2i+n+1). \tag{7-38c}$$

由(7-38c)式,(7-34)式和(7-37)式得到 $C_{(2)}(f)$ 和 $C_{(3)}(f)$ 的本征值

$$\lambda_{(2)}(f)=\frac{f}{2}+\frac{1}{2}\sum_i\nu_i(\nu_i-2i),$$

$$\lambda_3(f)=\frac{1}{3}\left\{2f-\frac{3}{2}f^2+\sum_i\nu_i\left[\nu_i^2-\left(3i-\frac{3}{2}\right)\nu_i+3i(i-1)\right]\right\}. \tag{7-38d}$$

3. 酉群和置换群生成元之间的关系

(1) 假定粒子坐标全不相同

由(7-29a)式得到坐标置换算符

$$p_{ab}=\sum_{\alpha,\beta}^{n}e_{\alpha\beta}^{(a)}e_{\beta\alpha}^{(b)}. \tag{7-39a}$$

利用泡里矩阵和 $e_{\alpha\beta}$ 的关系:

$$\sigma_x=e_{12}+e_{21},\quad \sigma_y=i(e_{21}-e_{12}),$$

$$\sigma_z=(e_{11}-e_{22}),\quad 1=e_{11}+e_{22}. \tag{7-39b}$$

并令(7-39a)式中 $n=2$,就得到熟知的 $S\mathscr{U}_2$ 群生成元和置换群生成元之间的关系,即 Dirac 等式

$$p_{ab}=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_a\cdot\boldsymbol{\sigma}_b). \tag{7-39c}$$

把(7-39a)式表成 $S\mathscr{U}_n$ 群的无穷小算符 $e_{\alpha\beta}^{\prime(a)}e_{\beta\alpha}^{\prime(a)}$ 的函数得到

$$p_{ab}=\sum_{\alpha\beta}^{n}e_{\alpha\beta}^{\prime(a)}e_{\beta\alpha}^{\prime(b)}+\frac{1}{n}, \tag{7-39d}$$

$$e_{\alpha\beta}^{\prime}=e_{\alpha\beta}-\delta_{\alpha\beta}\frac{1}{n}\sum_{\gamma}e_{\gamma\gamma}.$$

(7-39d)式是 $S\mathscr{U}_2$ 情形下 Dirac 等式(7-39c)的推广.

直接验证可得到 S_f 群生成元 p_{ab} 和 U_n 群生成元 E_{ab} 之间的关系

$$E_{ab}E_{ba}=1+p_{ab}. \tag{7-40}$$

将上式作用在 $\varphi_\alpha^a\varphi_\beta^b$ 上,利用(7-18)式即可知道上式成立.

(2) 假定单粒子态全不相同

在此情况下,类似地态置换算符 $\mathscr{P}_{\alpha\beta}$ 可表为

$$\mathscr{P}_{\alpha\beta}=\sum_{a,b}^{f}e_{ab}^{(\alpha)}e_{ba}^{(\beta)}, \tag{7-41}$$

$$\mathscr{E}_{\alpha\beta}\mathscr{E}_{\beta\alpha}=1+\mathscr{P}_{\alpha\beta}. \tag{7-42}$$

由(7-40)式和(7-42)式也可看出, S_f 群和 U_n 群不对易, $\mathscr{S}_f$ 群和 $\mathscr{U}_n$ 群不对易.

习　　题

1. 推导(7-38d)式.

§7.3 U_n 群和 SU_n 群的 CSCO-II 和 CSCO-III

本节对态空间酉群同样成立,因此这里 U_n 群既可理解为坐标空间酉群,又可理解为态空间酉群. 为了叙述方便,以下假定 U_n 群为态空间酉群.

U_n 群参数个数 $r=n^2$，因此要找到 n^2 个两两互相对易的算符以构成 CSCO-III. 下面说明群链

$$U_n \supset U_{n-1} \supset \cdots \supset U_2 \supset U_1 \tag{7-43}$$

及其对应的内禀群链

$$\bar{U}_n \supset \bar{U}_{n-1} \supset \cdots \supset \bar{U}_2 \supset \bar{U}_1 \tag{7-44}$$

中所有各个群的 CSCO-I 合在一起构成 U_n 群的 CSCO-III.

由(5-236)式可知，U_n 群和其内禀群的 CSCO-I 相等，它们提供了 n 个互相对易的算符

$$I_k^{(n)}=\bar{I}_k^{(n)},\quad k=n,\ n-1,\ \cdots,\ 2,\ 1. \tag{7-45a}$$

$$I_k^{(n)}=\sum_{i_1\cdots i_k}^{n} E_{i_1i_2}E_{i_2i_3}\cdots E_{i_ki_1}. \tag{7-45b}$$

以后仍用 C 代表 CSCO-I

$$C=\{I_k^{(n)}\}\equiv(I_n^{(n)},\ I_{n-1}^{(n)},\ \cdots,\ I_2^{(n)},\ I_1^{(n)}). \tag{7-46}$$

用 $C(s)$，$\bar{C}(s)$ 代表子群链(7-43)式和(7-44)式的 CSCO

$$\begin{aligned} C(s)&=(\{I_k^{(n-1)}\},\ \cdots,\ \{I_k^{(2)}\},\ I_1^{(1)}),\\ \bar{C}(s)&=(\{\bar{I}_k^{(n-1)}\},\ \cdots,\ \{\bar{I}_k^{(2)}\},\ \bar{I}_1^{(1)}). \end{aligned} \tag{7-47a}$$

式中

$$\left.\begin{aligned} I_k^{(m)}&=\sum_{i_1\cdots i_k}^{m} E_{i_1i_2}E_{i_2i_3}\cdots E_{i_ki_1},\\ \bar{I}_k^{(m)}&=\sum_{i_1\cdots i_k}^{m} \bar{E}_{i_1i_2}\bar{E}_{i_2i_3}\cdots \bar{E}_{i_ki_1}, \end{aligned}\right\}\quad m=n-1,\ \cdots,\ 2,\ 1. \tag{7-47b}$$

容易证明 $C(s)$ 和 $\bar{C}(s)$ 中所有的算符都互相对易，且都和 C 对易：因为 C 为 U_n 群的不变算符，所以它和其子群 U_m 的无穷小生成元都对易，$[C,\ E_{\alpha\beta}]=0$，而 $I_k^{(m)}$ 由 U_m 群的无穷小生成元所构成，所以 $[C,\ I_k^{(m)}]=0$. 类似地若 $U_m\supset U_{m'}$，则 U_m 群的不变算符 $I_k^{(m)}$ 和 $U_{m'}$ 群的无穷小生成元对易，因此 $[I_k^{(m)},\ I_l^{(m')}]=0$，等等.

$C(s)$ 中共包含 $\sum\limits_{m=1}^{n-1} m=\frac{1}{2}n(n-1)$ 个算符，因此

$$K=(C,\ C(s),\ \bar{C}(s)) \tag{7-48}$$

中共有 n^2 个互相对易的算符. Gelfand 证明了这 n^2 个算符都是独立的，所以 K 构成 U_n 群的 CSCO-III，群链(7-43)为正则链.

类似地可以证明 SU_n 群的正则链为

$$SU_n\supset SU_{n-1}\times U_1\supset SU_{n-2}\times U_1\supset\cdots\supset SU_2\times U_1\supset U_1. \tag{7-49}$$

SU_n 群和 $\overline{SU_n}$ 群的 CSCO-I 相等，包含 $n-1$ 个算符

$$C=\{I_k^{\prime(n)}\}=(I_n^{\prime(n)},\ I_{n-1}^{\prime(n)},\ \cdots,\ I_2^{\prime(n)}). \tag{7-50}$$

群链 (7-49) 中任一环 $SU_l\times U_1$ 提供 l 个算符，其中 $l-1$ 个为 SU_l 的 CSCO-I，$\{I_k^{\prime(l)}\}=(I_l^{\prime(l)},\ I_{l-1}^{\prime(l)},\ \cdots,\ I_2^{\prime(l)})$，另一个为 U_1（其基本表示由单粒子态 φ_{l+1} 所荷载）的 CSCO，即 $E_{l+1,l+1}$. 由于 $E_{l+1,l+1}$ 不满足零迹要求(5-120)式，因此不是 SU_n 群的无穷小算符，故需取 $E_{l+1,l+1}$ 和 E_{11}，…，E_{ll} 的某种线性组合，使其满足零迹要求，通常取(5-126)的形式（显然这种取法不是唯一的）. 即

$$H_l=\frac{1}{l+1}\Big(\sum_{i=1}^{l}E_{ii}-lE_{l+1,l+1}\Big)=\frac{1}{l+1}\Big(\sum_{i=1}^{l}\hat{n}_i-l\hat{n}_{l+1}\Big),\ l=n-1,\ \cdots,\ 1. \tag{7-51}$$

式中 $\hat{n}_i$ 为 i 态粒子数算符. 这里利用了(7-11)式.

显然 H_l 互相对易，且和 SU_m 群（$m=n$，…，2）不变算符 $I_k^{\prime(m)}$ 对易：因为由 (7-25) 式

看到，$I_k^{(m)}$ 作用在任一多粒子态上，不会改变任一单粒子态中所处的粒子数.

(7-49)式中所有子群的 CSCO-I 合在一起构成

$$C(s)=(\{I_k^{(n-1)}\},\ \cdots,\ I_2^{(2)};\ H_{n-1},\ \cdots,\ H_2,\ H_1). \tag{7-52a}$$

其中共包含 $\frac{1}{2}n(n-1)$ 个算符. 对应的内禀子群链的算符为

$$\bar{C}(s)=(\{\bar{I}_k^{(n-1)}\},\ \cdots,\ \bar{I}_2^{(2)};\ \bar{H}_{n-1},\ \cdots,\ \bar{H}_2,\ \bar{H}_1). \tag{7-52b}$$

(7-50)式和(7-52)式合在一起共有 $r=n^2-1$ 个算符，构成 SU_n 群的 CSCO-III，$K=(C,C(s),\bar{C}(s))$；而$(C,\ C(s))$为 SU_n 群的 CSCO-II.

权矢量(weight vector)：由 l 秩李群的 l 个互相对易的无穷小算符 $(H_1,\ H_2\cdots H_l)$ 的本征值所构成的 l 维矢量称为权矢量，或简称为权(weight).

例如若 $\lambda_{n-1},\ \lambda_{n-2},\ \cdots,\ \lambda_1$ 为 SU_n 群无穷小算符 $H_{n-1},\ H_{n-2},\ \cdots,\ H_1$ 的本征值，则 $\lambda=(\lambda_{n-1},\ \lambda_{n-2},\ \cdots,\ \lambda_1)$ 称为 SU_n 群的权矢量. 而 J_z 的本征值 m 就是 $SU_2(SO_3)$ 群的(一维)权矢量.

最高权：若权矢量 $\lambda-\lambda'$ 的头一个非零分量为正，则说 $\lambda>\lambda'$. $IR[\nu]$ 中最大的一个权矢量称为最高权(highest weight).

如 SU_2 群中，对 $IR\ (j)$，$m=j$ 为最高权.

注意 权矢量中各分量的次序可以有不同的选取. 但一经选定，则要贯彻始终. 例如也可选$(\lambda_1,\ \lambda_2\cdots\lambda_{n-1})$作为 SU_n 的权. 由此可见，最高权只有相对意义，它和所选的分量次序有关.

标志李群 G 的 IR 基的分量需要用 $C(s)$ 的本征值. $C(s)$ 中除了 $H_1,\ \cdots,\ H_l$ 外，还包含其它算符. 因此权矢量不足以构成群 G IR 的分量指标. 一般说，在同一个 IR 内，一个权矢量可以对应于几个基矢. 不过可以证明(见 Racah 或 Wybourne)，一个 IR 内，最高权只唯一对应于该表示内的一个基矢. 因此可用最高权来标志李群的 IR. 如 SU_2 群中，可用最高权 $m=j$ 标志 IR.

例 1 SU_2 群

自旋向上或向下的两个态 $\varphi_{1/2},\ \varphi_{-1/2}$ 荷载 SU_2 群的基本表示. SU_2 群的无穷小算符为 $\sigma_x,\ \sigma_y,\ \sigma_z$((7-39b)式). SU_2 群的 CSCO-I 由一个算符 $I'^{(2)}$ 构成. 由(7-24)式、(7-25)式和(7-39b)式可求得

$$I'^{(2)}=2\boldsymbol{J}^2=2(J_x^2+J_y^2+J_z^2), \tag{7-53}$$

式中 $\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$. 我们当然也可取 $I'^{(2)}/2$ 即 $\boldsymbol{J}^2$ 为 SU_2 群的 CSCO-I，这就和第五章给出的结果相一致.

SU_2 群的 IR 可用配分 $[\nu]=[m_{12},\ m_{22}]$，或用 $\boldsymbol{J}^2=I'^{(2)}/2$ 的本征值标志. 由 (7-25b)式和(7-38c)式得

$$\boldsymbol{J}^2=(m_{12}-m_{22})/2((m_{12}-m_{22})/2+1).$$

根据 $\boldsymbol{J}^2=J(J+1)$，得到量子数 J 和配分 $[\nu]=[m_{12},\ m_{22}]$ 的关系为

$$J=(m_{12}-m_{22})/2. \tag{7-54a}$$

我们通常用 J 而不是用 $J(J+1)$ 来标志 SU_2 群的不可约表示. 配分 $[\nu]=[m_{12},\ m_{22}]$ 可用粒子数 $f=m_{12}+m_{22}$ 和角动量 J 表示出来

$$[\nu]=\left[\frac{f}{2}+J,\ \frac{f}{2}-J\right]. \tag{7-54b}$$

关于(7-54)式的物理解释,我们在后面(7-72a)式再讨论. SU_2 群的正则子群链为 $SU_2\supset U_1$. SU_2 群 CSCO-II 和 CSCO-III 为(J^2, J_z)和$(J^2, J_z, \bar{J}_z)$(见第五章).

例2 SU_3 群

三种味层子 u, d, s 荷载 SU_3 群的基本表示. 而 (u, d), (u, s), (s, u) 所荷载的子群 SU_2 的基本表示,分别对应于同位旋 I, U 旋和 V 旋表象. 正则链为 $SU_3\supset SU_2\times U_1\supset SO_2$. SU_3 群的八个无穷小算符见(5-110)式和(5-123)式. SU_3 群的 CSCO-I 为 $C=(I_3^{\prime(3)}, I_2^{\prime(3)})$; SU_2 群和 SO_2 群的 CSCO-I 分别为同位旋 I^2 和其 z 分量 I_z. U_1 群的 CSCO-I 可取超荷

$$Y=\frac{1}{3}(E_{11}+E_{22}-2E_{33}).$$

Y 就是(7-51)式中的 H_2. 超荷的物理意义见(7-72c)式. SU_3 群的 CSCO-II 为:

$$(C;\ C(s))=(I_3^{\prime(3)},\ I_2^{\prime(3)};\ I^2,\ I_z,\ Y), \tag{7-55a}$$

(I_z, Y)为权矢量.

SU_3 群的 IR 基为其 CSCO-II 的本征函数,应由五个量子数标志:

$$\begin{pmatrix} I_3^{\prime(3)} \\ I_2^{\prime(3)} \\ I^2 \\ I_z \\ Y \end{pmatrix} \psi_{II_zY}^{(m)}=\begin{pmatrix} p \\ q \\ I(I+1) \\ I_z \\ Y \end{pmatrix} \psi_{II_zY}^{(m)}. \tag{7-55b}$$

SU_3 群的 IR 也可用配分标志. 后面将证明标志 SU_3 群的 IR 只需用包含两个整数的配分 $[\nu]=[m_{13}, m_{23}]$, 或用另外两个数 $\lambda=m_{13}-m_{23}$, $\mu=m_{23}$. SU_3 群的 CSCO-I$(I^{\prime(3)}, I^{\prime(2)})$ 的本征值(p, q)为 λ 和 μ 的函数. 例如由 (7-38c) 式和 (7-25b) 式并注意粒子数 $f=m_{13}+m_{23}=\lambda+2\mu$, 可求得

$$q=2\left[\frac{1}{3}(\lambda-\mu)^2+\lambda+\mu+\lambda\mu\right]. \tag{7-55c}$$

以后我们常用 $\psi_{II_zY}^{(m)}$ 代表 SU_3 群的一个不可约基.

SU_3 群的 CSCO-III 由八个算符所组成:

$$(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))=(I_3^{\prime(3)},\ I_2^{\prime(3)};\ I^2,\ I_z,\ Y,\ \bar{I}^2,\ \bar{I}_z,\ \bar{Y}).$$

它们在群上函数空间的共同本征函数即为 SU_3 群的 IR 矩阵元

$$D_{II_zY,\bar{I}\bar{I}_z\bar{Y}}^{(m)}(a^1a^2\cdots a^8)$$

式中 $a^1\cdots a^8$ 为群参数. 关于 SU_3 群 IR 矩阵的讨论见 Akyeampong 的文章.

§7.4 酉群 Gelfand 基和 Gelfand 矩阵元

$U_n\supset U_{n-1}\supset\cdots\supset U_2\supset U_1$(或 $SU_n\supset SU_{n-1}\times U_1\supset\cdots\supset SU_2\times U_1$)分类基又称为 $U_n(SU_n)$ Gelfand 基(见 Gelfand (1950)和 Baird(1963)). 通常用 Gelfand 记号来标志这种 IR 基

$$\left|\begin{pmatrix} [\nu] \\ (m) \end{pmatrix}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix} m_{1n} \quad m_{2n} \quad \cdots \quad m_{nn} \\ m_{1n-1} \quad \cdots \quad m_{n-1n-1} \\ \cdots \\ m_{12}m_{22} \\ m_{11} \end{pmatrix}\right\rangle. \tag{7-56}$$

$[\nu]=[m_{1n}, m_{2n}, \cdots, m_{nn}]$. 对 SU_n 群, $m_{nn}=0$ (见 (7-71) 式). (7-56)式属于 U_l 群的 IR $[m_{1l}, m_{2l}, \cdots, m_{ll}]$, $l=n, n-1, \cdots, 1$. 上式中的 m_{ij} 都为正整数,并满足条件

$$\begin{matrix} m_{i,j+1} \geqslant m_{i+1,j+1} \\ \vee \quad\quad \wedge \\ m_{ij} \end{matrix}$$

Gelfand 基(7-56)是 U_n 群 CSCO-II$(C, C(s))$(见(7-46)、(7-47)式)的共同本征函数. 虽然原则上也可用$(C, C(s))$的本征值来标志一个 Gelfand 基,例如 SU_3 群的 Gelfand 基可用 p, q, I, I_z, Y 标志(见(7-55)式),但这总不如用 Gelfand 记号,即一串配分$[m_{1n}\cdots m_{nn}]$ $\cdots[m_{12}m_{22}][m_{11}]$来标志更为方便. $I_k^{(n)}$ 的本征值和配分的关系见(7-38a)式(该式对 U_n 群的子群 U_{n-1} 等仍成立).

为了给 Gelfand 基((7-56)式)编号,我们将每一个 Gelfand 记号和一个向量 $\boldsymbol{m}$ 相对应

$$\boldsymbol{m}=(m_{1n}, \cdots, m_{nn}, m_{1n-1}, \cdots, m_{n-1n-1}, \cdots, m_{12}, m_{22}, m_{11})$$

我们约定,如果向量 $\boldsymbol{m}-\boldsymbol{m}'$ 的头一个非零分量为正,则 Gelfand 基 $\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m)\end{pmatrix}\right\rangle$ 的编号小于 $\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m')\end{pmatrix}\right\rangle$ 的编号. 例子见表 7·5-2.

Gelfand 和 Zetlin (1950), 以及 Baird 和 Biedenharn (1963) 给出了 U_n 群无穷小算符在 Gelfand 表象中的矩阵元的普遍公式,这里只给出 $n=2, 3$ 两个特例:

$$E_{21}\begin{pmatrix} m_{12} & & m_{22} \\ & m_{11} & \end{pmatrix}=[(m_{11}-m_{22})(m_{12}-m_{11}+1)]^{1/2}\begin{pmatrix} m_{12} & & m_{22} \\ & m_{11}-1 & \end{pmatrix}, \qquad (7\text{-}57\text{a})$$

$$E_{32}\begin{pmatrix} m_{13} & m_{23} & m_{33} \\ & m_{12} \quad m_{22} & \\ & m_{11} & \end{pmatrix}$$

$$=\left[\frac{m_{11}-m_{12}}{m_{22}-m_{12}-1}\right]^{\frac{1}{2}}\left[(-)\frac{(m_{13}-m_{12}+1)(m_{23}-m_{12})(m_{33}-m_{12}-1)}{(m_{22}-m_{12})}\right]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} m_{13} & m_{23} & m_{33} \\ & m_{12}-1, \quad m_{22} & \\ & m_{11} & \end{pmatrix}$$

$$+\left[\frac{m_{11}-m_{22}+1}{m_{12}-m_{22}+1}\right]^{\frac{1}{2}}\left[(-)\frac{(m_{13}-m_{22}+2)(m_{23}-m_{22}+1)(m_{33}-m_{22})}{(m_{12}-m_{22}+2)}\right]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix} m_{13} & m_{23} & m_{33} \\ & m_{12}, \quad m_{22}-1 & \\ & m_{11} & \end{pmatrix}. \qquad (7\text{-}57\text{b})$$

利用 (7-17), 由相邻指标的无穷小算符 $E_{i,i-1}$ 的表示矩阵可导出非相邻指标的无穷小算符 E_{ij} 的表示矩阵. 由 $E_{ij}^{\dagger}=E_{ji}$ 可从 E_{ij} 的矩阵导出 E_{ji} 的矩阵.

随着 n 的增加 $E_{n,n-1}$ 的 Gelfand 矩阵元的公式的复杂性迅速增加. Paldus(1974)对配分 $[m_{1n}\cdots m_{nn}]$ 所对应的杨图只有两列的情形(因此 $m_{ij}\leqslant 2$) 给出了简化公式. Paldus 引进记号

$$\left|\begin{matrix} a_n & b_n & c_n \\ a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ a_1 & b_1 & c_1 \end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix} m_{1n} \ m_{2n} \ \cdots \ m_{nn} \\ m_{1n-1} \ \cdots \ m_{n-1n-1} \\ \cdots \\ m_{11} \end{pmatrix}\right\rangle, \qquad (7\text{-}58\text{a})$$

式中 a_i, b_i, c_i 分别为配分$[m_{1i}m_{2i}\cdots m_{ii}]$中等于 2、1 和 0 的 m_{li} 的数目. 例如 U_5 群

$$\left|\begin{matrix}1\ 1\ 3\\1\ 1\ 2\\1\ 1\ 1\\0\ 2\ 0\\0\ 1\ 0\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix}2\ 1\ 0\ 0\ 0\\2\ 1\ 0\ 0\\2\ 1\ 0\\1\ 1\\1\end{pmatrix}\right\rangle.$$

在这种情况下，Gelfand 矩阵元的公式可简化为

$$E_{i+1,i}\left|\begin{matrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ a_{i+1} & b_{i+1} & c_{i+1}\\ a_i & b_i & c_i\\ a_{i-1} & b_{i-1} & c_{i-1}\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{matrix}\right\rangle=\left[\frac{b_i(b_i+1)}{(b_{i-1}+1)(b_{i+1}+1)}\right]^{1/2}\left|\begin{matrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ a_{i+1} & b_{i+1} & c_{i+1}\\ a_i & b_i-1 & c_i+1\\ a_{i-1} & b_{i-1} & c_{i-1}\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{matrix}\right\rangle$$

$$+\left[\frac{(b_i+1)(b_i+2)}{(b_{i-1}+1)(b_{i+1}+1)}\right]^{1/2}\left|\begin{matrix}\cdots & \cdots & \cdots\\ a_{i+1} & b_{i+1} & c_{i+1}\\ a_i-1 & b_i+1 & c_i\\ a_{i-1} & b_{i-1} & c_{i-1}\\ \cdots & \cdots & \cdots\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-58b}$$

这里约定 $a_0=b_0=c_0\equiv 0$. 上式右边第一项不为零的条件为

$$b_i\neq 0,\quad c_{i+1}-1=c_i=c_{i-1}.$$

第二项不为零的条件为

$$a_i\neq 0,\ a_{i+1}=a_i=a_{i-1}+1.$$

Gelfand 基有一系列优点:

(1) 它是正交归一基

$$\left\langle\begin{pmatrix}[\nu']\\(m')\end{pmatrix}\middle|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m)\end{pmatrix}\right\rangle=\delta_{\nu\nu'}\delta_{(m)(m')}$$

(2) 因为 $U_n\supset U_{n-1}\supset\cdots\supset U_2\supset U_1$ 是正则链，它不存在多重性问题(即为 multiplicity free)，即不必引入附加指标，光用 Gelfand 记号就足以唯一标志 U_n 群的一个 IR 基.

(3) 酉群的无穷小算符在此基上的矩阵元有代数表达式.

(4) 它和置换群亚标准基有密切联系(下面将证明酉群 Gelfand 基就是置换群亚标准基).

因此 Gelfand 基的应用很广，但它也有一个很大缺点，即它往往不是物理上所需要的分类基(除少数情形外，如基本粒子 SU_3, SU_4 层子模型中，Gelfand 基就是物理上所需要的分类基，见 §7.5 第 2 小节).

习　　题

1. 利用(7-57)式证明$E_{32}E_{23}$在以$\left|\begin{pmatrix}2\ 1\ 0\\2\ 0\\1\end{pmatrix}\right\rangle$和$\left|\begin{pmatrix}2\ 1\ 0\\1\ 1\\1\end{pmatrix}\right\rangle$为基的空间中的表示矩阵$=I+D^{[21]}(23)$, I为单位矩阵, $D^{[21]}(23)$为置换算符(23)的不可约矩阵.

2. 利用 $E_{13}=[E_{12},\ E_{23}]$, 计算 $E_{13}\left|\begin{pmatrix}2\ 1\ 0\\1\ 1\\1\end{pmatrix}\right\rangle$.

§7.5 酉群 Gelfand 基和置换群亚标准基

1. 酉群的 CSCO-II 和置换群断链的 CSCO

现在我们要把(7-37)式推广到 $\mathscr{U}_n$ 子群的不变算符和 $\mathscr{S}_f$ 的子群的 CSCO-I 之间的关系. 仍考虑 $(m_1)^{f_1}(m_2)^{f_2}\cdots(m_n)^{f_n}$ 组态, $\sum_i^n f_i=f$.

类似于(7-31)式,我们定义一个算符

$$P_k^{(f-f_n)}=\binom{f-f_n}{k}^{-1}\frac{1}{k!}\sum_{a_1>a_2>\cdots>a_k}^{f}\ \sum_{i_1i_2\cdots i_k}^{n-1}\left(e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_3}^{(a_2)}\cdots e_{i_ki_1}^{(a_k)}\right)_s. \tag{7-59}$$

将 $P_k^{(f-f_n)}$ 作用在正序态

$$|\omega\rangle=|\overbrace{m_1\cdots m_1}^{f_1}\overbrace{m_2\cdots m_2}^{f_2}\cdots\overbrace{m_n\cdots m_n}^{f_n}\rangle \tag{7-60}$$

上,并利用(7-7b)式得:

$$\begin{aligned}P_k^{(f-f_n)}|\omega\rangle&=\binom{f-f_n}{k}^{-1}\frac{1}{k!}\sum_{a_1>a_2>\cdots>a_k}^{f-f_n}(a_1a_2\cdots a_k)_s|\omega\rangle\\&=\frac{1}{g_k'}\sum_{a_1>a_2>\cdots>a_k}^{f-f_n}(a_1(a_2\cdots a_k)_s)|\omega\rangle\\&=\frac{1}{g_k'}C_{(k)}(f-f_n)|\omega\rangle=\frac{1}{g_k'}\mathscr{C}_{(k)}(f-f_n)|\omega\rangle\\&=\mathscr{C}^{(k)}(f-f_n)|\omega\rangle,\end{aligned} \tag{7-61}$$

式中最后一步利用了(3-110)式, 即 $p|\omega\rangle=\mathscr{P}^{-1}|\omega\rangle$, 而 $g_k'=\binom{f-f_n}{k}(k-1)!$ (见(1-23)式). 这里 $C_{(k)}(f-f_n)$ 为 $S_{f-f_n}(1,2\cdots f-f_n)$ 群的 k 循环类算符, 而 $\mathscr{C}^{(k)}(f-f_n)$ 为态置换群 $\mathscr{S}_{f-f_n}(i_1i_2\cdots i_{f-f_n})$ 的 k 循环平均类算符.

类似地可证明 $P_k^{f-f_n}$ 作用在非正序态

$$|\widetilde{\omega}\rangle=p|\omega\rangle=\begin{pmatrix}1&2&\cdots&f\\p_1&p_2&\cdots&p_f\end{pmatrix}|\omega\rangle \tag{7-62}$$

上为

$$\begin{aligned}P_k^{f-f_n}|\widetilde{\omega}\rangle&=\binom{f-f_n}{k}^{-1}\frac{1}{k!}\sum_{a_1>a_2>\cdots>a_k}{}'(a_1a_2\cdots a_k)_s|\widetilde{\omega}\rangle\\&=\frac{1}{g_k'}C_{(k)}(f-f_n)'|\widetilde{\omega}\rangle=\mathscr{C}^{(k)}(f-f_n)|\widetilde{\omega}\rangle.\end{aligned} \tag{7-63}$$

式中求和号上带撇表示 $a_1, a_2, \cdots, a_k$ 只能从 $p_1, p_2, \cdots, p_{f-f_n}$ 中取. $C_{(k)}(f-f_n)'$ 为置换群 $S_{f-f_n}(p_1p_2\cdots p_{f-f_n})$ 的 k 循环类算符. 例如若 $n=3$, $f=6$, $f_n=2$,

$$|\omega\rangle=|m_1m_1m_2m_2m_3m_3\rangle,\ p=\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6\\6&2&1&5&3&4\end{pmatrix},$$

$$|\widetilde{\omega}\rangle=p|\omega\rangle=|m_2m_1m_3m_3m_2m_1\rangle.$$

由(7-59)式和(7-10)式可求出

$$P_2^4|\tilde{\omega}\rangle=\left(\frac{1}{6}\sum_{a_1>a_2}^{6}\sum_{i_1i_2}^{m_2}e_{i_1i_2}^{(a_1)}e_{i_2i_1}^{(a_2)}\right)(\varphi_{m_2}^{(1)}\varphi_{m_1}^{(2)}\varphi_{m_2}^{(3)}\varphi_{m_1}^{(4)}\varphi_{m_2}^{(5)}\varphi_{m_1}^{(6)})$$

$$=\frac{1}{6}[(12)+(15)+(16)+(25)+(26)+(56)]|\tilde{\omega}\rangle$$

$$=\frac{1}{6}C_{(2)}(4)'|\tilde{\omega}\rangle=\frac{1}{6}\mathscr{C}_{(2)}(4)|\tilde{\omega}\rangle.$$

$C_{(2)}(4)'$ 为 $S_4(1256)$ 群的二循环类算符．因此，作用在任一态 $p|\omega\rangle$ 上，$P_k^{f-f_n}$ 总是等价于态置换群 $\mathscr{S}_{f-f_n}$ 的 k 循环平均类算符 $\mathscr{C}^{(k)}(f-f_n)$．另一方面，类似于(7-31)式和(7-33)式，可将 $P_k^{f-f_n}$ 表为 $\mathscr{U}_{n-1}$ 群的不变算符 $\mathscr{I}_k^{(n-1)}, \mathscr{I}_{k-1}^{(n-1)}, \cdots, \mathscr{I}_2^{(n-1)}, \mathscr{I}_1^{(n-1)}$ 的函数；反过来，$\mathscr{I}_k^{(n-1)}$ 也可表成 $\mathscr{S}_{f-f_n}$ 群类算符 $\mathscr{C}_{(k)}(f-f_n), \cdots, \mathscr{C}_{(2)}(f-f_n)$ 的函数，也就是说，可表成 $\mathscr{S}_{f-f_n}$ 群的 CSCO-I 的函数，即

$$\mathscr{I}_k^{(n-1)}=F_k^{(n-1)}(\mathscr{C}(f-f_n)). \tag{7-64a}$$

类似地可证明

$$\begin{aligned}&\mathscr{I}_k^{(n-2)}=F_k^{(n-2)}(\mathscr{C}(f-f_n-f_{n-1})),\\&\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\&\mathscr{I}_k^{(2)}=F_k^{(2)}(\mathscr{C}(f_1+f_2)),\\&\mathscr{I}^{(1)}=f.\end{aligned} \tag{7-64b}$$

§4.8 讲过，置换群 $\mathscr{S}_f$ 的亚标准基 $\psi^{(\nu)\kappa}$ 为置换群断链 $\mathscr{S}_f\supset\mathscr{S}_{f-f_n}\supset\cdots\supset\mathscr{S}_{f_1+f_2}\supset\mathscr{S}_{f_1}$ 的完备算符集 $(\mathscr{C}(f), \mathscr{C}(f-f_n)\cdots\mathscr{C}(f_1+f_2), \mathscr{C}(f_1))$ 的共同本征函数．由(7-37)式和(7-64)式可知，亚标准基 $\psi^{(\nu)\kappa}$ 必为 $\mathscr{U}_n$ 群的 CSCO-II$(C, C(s))$（见(7-46)，(7-47)式）的本征函数．由此我们得到

定理 置换群亚标准基就是酉群的 Gelfand 基．

又因为置换群标准基是亚标准基的特例，因此置换群标准基也是酉群 Gelfand 基．例如

$$|Y_m^{[\nu]}\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline\alpha&\beta&\delta\\\hline\gamma\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix}3&1&0&0\\&2&1&0\\&&2&0\\&&&1\end{pmatrix}\right\rangle=\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m)\end{pmatrix}\right\rangle. \tag{7-65}$$

由于以上事实，由(7-40)式立即得到置换群标准矩阵元 $D_{m'm}^{[\nu]}(ij)$ 和 Gelfand 矩阵元之间的关系

$$D_{m'm}^{[\nu]}(ij)=\sum_{(m'')}\left\langle\begin{pmatrix}[\nu]\\(m')\end{pmatrix}\right|E_{ij}\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m'')\end{pmatrix}\right\rangle\left\langle\begin{pmatrix}[\nu]\\(m)\end{pmatrix}\right|E_{ij}\left|\begin{pmatrix}[\nu]\\(m'')\end{pmatrix}\right\rangle-\delta_{m'm} \tag{7-66}$$

由此可知，我们按置换群 Yamanouchi 位相规则定下的 IR 基同时就满足酉群 IR 基的 Gelfand-Biedenharn 位相约定，即 $E_{i,i-1}$ 矩阵元大于或等于零．

2．Gelfand 基的标志和求法

第四章中我们用 Weyl 盘标志态置换群亚标准基，现在可用它来标志酉群 Gelfand 基．由于 Weyl 盘和 Gelfand 记号一一对应（见§4.8第4小节），我们可以根据杨图[ν]中所允许的 Weyl 盘数来得到酉群的维数 $h_\nu(\mathscr{U}_n)$．即 $h_\nu(\mathscr{U}_n)$ 等于将 n 个态 $m_1, m_2, \cdots, m_n$ 按各种方式填入杨图[ν]所构成的 Weyl 盘数目．例如 $n=3$，$m_1=u$，$m_2=d$，$m_3=s$，按§4.8第4小节填写 Weyl 盘规则，可得到[ν]＝[21]表示的维数 $h_\nu(\mathscr{U}_3)=8$，对应于以下八个 Weyl

盘:

$$
\begin{array}{|c|c|}\hline u & u \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline u & u \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline d & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}\quad
\begin{array}{|c|c|}\hline d & s \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}
\tag{7-67}
$$

由 § 4.8 第 4 小节我们知道，当 Weyl 盘 $W_k^{[\nu]}$ 的同一列中有两个指标相同时，Gelfand 基 $|W_k^{[\nu]}\rangle=0$. 由此可知，$\mathscr{U}_n$ 或 $S\mathscr{U}_n$ 群 $IR[\nu]$ 的对应的杨图的行数只能小于、等于 n（否则同一列中必出现相同指标）.

$\mathscr{U}_n$ 群维数的一般公式为(见 Hamermesh)：

$$
h_{[\nu]}(\mathscr{U}_n)=\prod_{1\leqslant i<j\leqslant n}\frac{(\nu_i-i-\nu_j+j)}{j-i}. \tag{7-68}
$$

例如 $\mathscr{U}_3$ 或 $S\mathscr{U}_3$ 群的维数公式可由上式算得

$$
h_{(\lambda\mu)}(S\mathscr{U}_3)=\frac{1}{2}(\lambda+1)(\mu+1)(\lambda+\mu+2)
$$

这里 $\lambda=\nu_1-\nu_2$, $\mu=\nu_2-\nu_3$.

Robinson 给出了计算 $\mathscr{U}_n$ 群维数 h_ν 的简单公式. 例如对 $\mathscr{U}_n$ 群 $IR[422]$,

$$
h_{[422]}(\mathscr{U}_n)=\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline n & n+1 & n+2 & n+3 \\ \hline n-1 & n \\ \cline{1-2} n-2 & n-1 \\ \cline{1-2}\end{array}\Bigg/\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 6 & 5 & 2 & 1 \\ \hline 3 & 2 \\ \cline{1-2} 2 & 1 \\ \cline{1-2}\end{array}
$$

$$
=\frac{n^2(n+1)(n+2)(n+3)(n-1)(n-2)(n-1)}{6\cdot5\cdot2\cdot1\cdot3\cdot2\cdot2\cdot1}. \tag{7-69}
$$

式中分母杨图中填写规则和求置换群 IR 维数一样，即为每个方格的曲距，而分子杨图中所有对角线上的方块都填 n，向右（下）移动时，每移动一格将数字加（减）1.

$[21^{n-2}]$ 称为 $S\mathscr{U}_n$ 群的伴随表示，容易求出它的维数为 n^2-1

$$
h_{[21^{n-2}]}(S\mathscr{U}_n)=\begin{array}{|c|c|}\hline n & n+1 \\ \hline n-1 \\ \cline{1-1} \vdots \\ \cline{1-1} 3 \\ \cline{1-1} 2 \\ \cline{1-1}\end{array}\Bigg/\begin{array}{|c|c|}\hline n & 1 \\ \hline n-2 \\ \cline{1-1} \vdots \\ \cline{1-1} 2 \\ \cline{1-1} 1 \\ \cline{1-1}\end{array}=\frac{(n+1)!}{n\cdot(n-2)!}=n^2-1.
$$

例如(7-67)式中八个态构成 SU_3 群伴随表示[21]的基.

SU_n 群有 n^2-1 个无穷小算符，它又是单纯群，根据 § 5-5 的讨论可知，它的 n^2-1 个无穷小算符构成 SU_n 李代数的一个 IR 称为伴随表示，即 $[21^{n-2}]$ 表示.

现在来研究 $\mathscr{U}_n$ 群的一维全反对称表示 $[1^n]$ 的基在酉群元素 $\mathscr{R}$ 作用下的变换性质

$$
\mathscr{R}\left|\begin{array}{|c|}\hline m_1 \\ \hline m_2 \\ \hline \vdots \\ \hline m_n \\ \hline\end{array}\right\rangle=\mathscr{R}\left[\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{m_1\cdots m_n}\epsilon_{m_1\cdots m_n}\varphi_{m_1}^{a_1}\cdots\varphi_{m_n}^{a_n}\right]
$$

$$
=\frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{\substack{m_1\cdots m_n\\ m_1'\cdots m_n'}}\epsilon_{m_1\cdots m_n}\mathscr{D}_{m_1'm_1}\cdots\mathscr{D}_{m_n'm_n}\varphi_{m_1'}^{a_1}\cdots\varphi_{m_n'}^{a_n}
$$

$$
=\det(\mathscr{D})\,|[1^n]\rangle=e^{i\varphi}|[1^n]\rangle \tag{7-70a}
$$

这里利用了(5-72b)式及行列式展开式:

$$\det(\mathscr{D})=\sum_{i_1\cdots i_n}\epsilon^{i_1\cdots i_n}\epsilon^{i'_1\cdots i'_n}\mathscr{D}_{i'_1i_1}\cdots\mathscr{D}_{i'_ni_n}\tag{7-70b}$$

类似地可证明

$$\mathscr{R}|[\overbrace{1^n1^n\cdots1^n}^{m}]\rangle=e^{im\varphi}|[\overbrace{1^n1^n\cdots1^n}^{m}]\rangle.\tag{7-70c}$$

假定 $\mathscr{U}_n$ 群有一 $IR[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]$，在杨图 $[\nu]$ 上加上由 n 个方块构成的一列后，得到一个新表示 $[\nu']=[\nu_1+1,\ \nu_2+1,\ \cdots,\ \nu_n+1]$，$[\nu']$ 所具有的 Weyl 盘数和 $[\nu]$ 一样(因 $[\nu']$ 的第一列必须填 $m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_n$)，因此 $[\nu]$ 和 $[\nu']$ 具有相同维数．根据(7-70a)式它们的 IR 矩阵的唯一差别是一个相因子 $\det(\mathscr{D})=e^{i\varphi}$．类似地表示 $[\nu']=[\nu_1+m,\ \nu_2+m,\ \cdots,\ \nu_n+m]$ 和 $[\nu]$ 的维数相同，IR 矩阵相差相因子 $e^{im\varphi}$，即

$$D^{[\nu_1\nu_2\cdots]}(\mathscr{U}_n)=e^{-im\varphi}D^{[\nu_1+m,\ \nu_2+m,\ \cdots]}(\mathscr{U}_n).\tag{7-70d}$$

如果我们处理的是 $S\mathscr{U}_n$ 群，$\det(\mathscr{D})=1$，则有

$$D^{[\nu_1\nu_2\cdots]}(S\mathscr{U}_n)=D^{[\nu_1+m,\ \nu_2+m\cdots]}(S\mathscr{U}_n).\tag{7-70e}$$

因此 $[\nu_1\cdots\nu_n]$ 和 $[\nu_1+m,\ \cdots,\ \nu_n+m]$ 等价．故对 $S\mathscr{U}_n$ 群只需考虑少于 n 行的那些杨图

$$[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]\equiv[\nu_1-\nu_n,\ \nu_2-\nu_n,\ \cdots,\ \nu_{n-1}-\nu_n,\ 0],\tag{7-71}$$

而 $[1^n]$ 或 $[1^n\cdots1^n]$ 等表示为 $S\mathscr{U}_n$ 群的恒等表示(identity representation)，用记号 $[0]$ 表示之．

$[1^n]$ 表示在物理上相当于一个满壳态．例如原子核壳模型中若有 $2j+1$ 个核子处于 j 子壳，则满壳态 $[1^{2j+1}]$ 在 $S\mathscr{U}_{2j+1}$ 群作用下等价于一个真空态，可不必考虑．

既然酉群 Gelfand 基就是置换群亚标准基，因此关于亚标准基的三种标志方法也适用于 Gelfand 基．除此外，还常用一些量子数来标志 Gelfand 基．例如 $S\mathscr{U}_2$ 群常用 $J,\ J_z$ 标志 Gelfand 基．$J,\ J_z$ 和 Gelfand 记号的关系为：

$$J=\frac{1}{2}(m_{12}-m_{22}),\quad J_z=m_{11}-\frac{1}{2}(m_{12}+m_{22}).\tag{7-72a}$$

上式中第一个结果我们已经在§7.3中得到过了(见(7-54)式)．其实利用 Weyl 盘可很容易证明(7-72a)式．令 $\alpha,\ \beta$ 分别代表电子或核子自旋朝上和朝下的态，在杨图 $[m_{12}m_{22}]$ 的第一行上全填以 α，第二行全填以 β．该 Weyl 盘所标志的态具有最大的 J_z 值，$J_z=(m_{12}-m_{22})/2$．因此总自旋必为 $J=(m_{12}-m_{22})/2$．下面再来看(7-72a)式中的第二个表达式．和 Gelfand 记号 $\begin{pmatrix}m_{12} & & m_{22}\\ & m_{11} & \end{pmatrix}$ 相对应的 Weyl 盘为：

$$\begin{pmatrix}m_{12} & & m_{22}\\ & m_{11} & \end{pmatrix}=\begin{array}{|c|c|}\hline m_{11}\text{个}\alpha & (m_{12}-m_{11})\text{个}\beta\\ \hline m_{22}\text{个}\beta & \\ \cline{1-1}\end{array}.\tag{7-72b}$$

J 的值当然仍为 $(m_{12}-m_{22})/2$．(因为同一个 $[\nu]$ 不同的 Weyl 盘对应同一个 J 值．)而

$$J_z=\frac{1}{2}[m_{11}-(m_{12}-m_{11}+m_{22})]=m_{11}-\frac{1}{2}(m_{12}+m_{22}).$$

基本粒子 SU_4 层子模型中，认为存在四种味层子 $u,\ d,\ s,\ c$，分别称为上层子，下层子，奇异层子和粲层子．它们荷载 $S\mathscr{U}_4$ 群的基本表示．这四种层子的量子数见表7.5-1．表中 Q 为电荷，$I,\ I_z$ 为同位旋及其第三分量，B 为重子数，S 为奇异数，C 为 charm(粲)数，Y 为超荷．Z 为 Haacke 定义的一量子数．I_z，超荷 Y 和 Z 的定义为

表 7.5-1　四种味层子所对应的量子数

	Q	I	I_z	B	S	C	Y	Z
u	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$
d	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{4}$
s	$-\frac{1}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	-1	0	$-\frac{2}{3}$	$\frac{1}{4}$
c	$\frac{2}{3}$	0	0	$\frac{1}{3}$	0	1	0	$-\frac{3}{4}$

$$I_z=\frac{1}{2}(n_u-n_d),$$

$$Y=B+S=\frac{1}{3}(n_u+n_d-2n_s),\ (\text{只适用于 } u,\ d,\ s \text{ 层子}) \qquad (7\text{-}72c)$$

$$Z=\frac{1}{4}(n_u+n_d+n_s-3n_c).$$

式中 n_u, n_d, …分别为 u 层子数和 d 层子数…. 通常取 u, d, s, c 分别为 1, 2, 3, 4 号态. I_z, Y, Z 分别为(7-51)式 H_1, H_2, H_3 的量子数. SU_4 群的一个 IR 基可以用以下三种方法标志：Gelfand 记号，Weyl 盘及一串量子数 $[\nu](\lambda\mu)IYZI_z$，它们之间的关系为

$$\begin{pmatrix} m_{14} & m_{24} & m_{34} & 0 \\ & m_{13} \ m_{23} \ m_{33} & & \\ & m_{12} \ m_{22} & & \\ & m_{11} & & \end{pmatrix}=\begin{array}{|l|}\hline m_{11}\text{ 个 }1,\ (m_{12}-m_{11})\text{ 个 }2,\ (m_{13}-m_{12})\text{ 个 }3,\ (m_{14}-m_{13})\text{ 个 }4 \\ \hline m_{22}\text{ 个 }2,\ (m_{23}-m_{22})\text{ 个 }3,\ (m_{24}-m_{23})\text{ 个 }4 \\ \hline m_{33}\text{ 个 }3,\ (m_{34}-m_{33})\text{ 个 }4 \\ \hline \end{array} \qquad (7\text{-}73a)$$

Gelfand 记号　　　　Weyl 盘(1, 2, 3, 4 代表态的编号)

$$[\nu]=[m_{14}m_{24}m_{34}],\quad \lambda=(m_{13}-m_{23}),\quad \mu=(m_{23}-m_{33})$$

$$I=\frac{1}{2}(m_{12}-m_{22}),\quad I_z=m_{11}-\frac{1}{2}(m_{12}+m_{22}) \qquad (7\text{-}73b)$$

$$Y=(m_{12}+m_{22})-\frac{2}{3}(m_{13}+m_{23}+m_{33}),\quad Z=m_{13}+m_{23}+m_{33}-\frac{3}{4}(m_{14}+m_{24}+m_{34}).$$

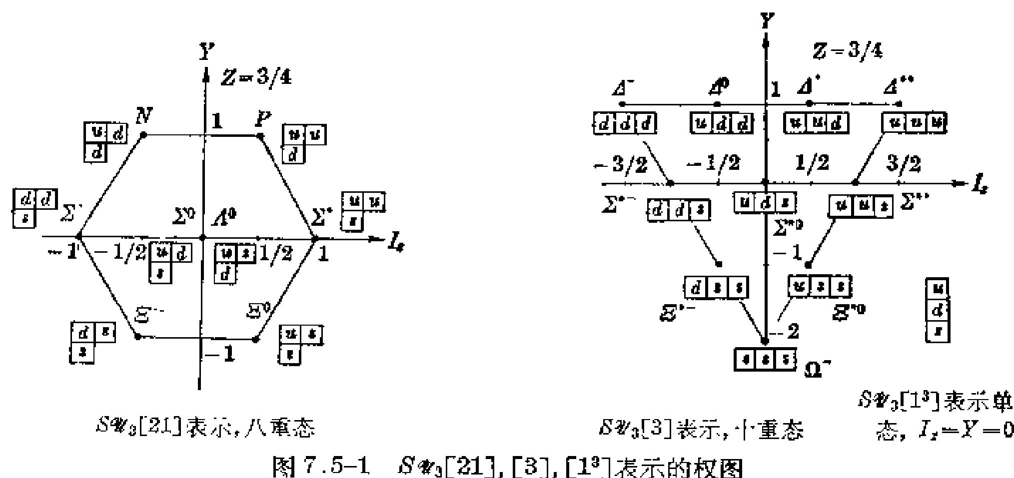
基本粒子理论中常常用 $S\mathscr{U}_n$ 群不可约表示的维数来标志 $S\mathscr{U}_n$ 群的不可约表示. 例如用(20)标志 SU_4 群的 20 维表示[21]，用(8)标志 SU_3 的 8 维表示[21]等. 书末附录中表 A1 列出了 SU_3-SU_6 群的 IR 维数和配分的对照关系.

例：我们将 $S\mathscr{U}_3$ 群 8 维表示(伴随表示)的八个基的三种标志方法列在表 7.5-2.

表 7.5-2　Su_3 8 维表示基矢的三种标志方法

粒子名称	P	N	Σ^+	Σ^0	Σ^-	Λ	Ξ^0	Ξ^-
$(I\ I_z,\ Y)$	$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2},\ 1\right)$	$\left(\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2},1\right)$	$(1\,1,\ 0)$	$(1\,0,\ 0)$	$(1\,-1,\ 0)$	$(0\,0,\ 0)$	$\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2},\ -1\right)$	$\left(\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2},\ -1\right)$
Weyl 盘	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & u \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & d \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & u \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline d & d \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & s \\ \hline d \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline u & s \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|}\hline d & s \\ \hline s \\ \cline{1-1}\end{array}$
Gelfand 记号	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\2\,1\\2\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\2\,1\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\2\,0\\2\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\2\,0\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\2\,0\\0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\1\,1\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\1\,0\\1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}2\,1\,0\\1\,0\\0\end{pmatrix}$

基本粒子文献中常把 $S\mathscr{U}_3$ 群 IR 基在以超荷 Y 为 y 轴，同位旋 z 分量为 x 轴的坐标图上标出。(I_3, Y) 为 SU_3 群权矢量，所以这种图又称为权图。图 7.5-1 给出 $S\mathscr{U}_3$ 群 10 维全对称表示[3]和 8 维表示[21]的权图：



$S\mathscr{U}_3$[21]表示，八重态　　$S\mathscr{U}_3$[3]表示，十重态　　$S\mathscr{U}_3[1^3]$表示单态，$I_z=Y=0$

图 7.5-1　$S\mathscr{U}_3$[21]，[3]，$[1^3]$表示的权图

从上图看到，$S\mathscr{U}_3$ 群[21]和[3]表示的最高权分别为 $(I_z, Y)=(1, 0)$ 和 $(3/2, 1)$，它们可用来标志 $S\mathscr{U}_3$ 群的 IR. [21]表示中权矢量(0, 0)对应于 Σ^0 和 Λ^0 两个粒子.

[21]表示为 $S\mathscr{U}_4$ 群的 20 维表示. $S\mathscr{U}_4$ 的权图是以 I_z, Y, Z 为坐标轴的三维空间图. 我们把它按 Z 值分成三个平面图，即 $Z=3/4$ (图 7.5-1 左边第一个图) 和 $Z=-1/4$, $Z=-5/4$(图 7.5-2).

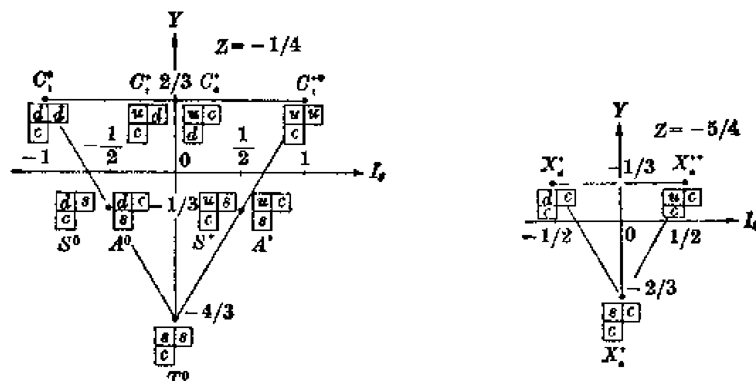


图 7.5-2　$S\mathscr{U}_4$[21]表示的权图($Z=3/4$ 的图见图 7·5-1)

现在让我们总结一下如何把 $\mathscr{U}_n$ 群的 n^f 个 n 维 f 秩张量 (7-4) 式约化成 $\mathscr{U}_n$ 群和 S_f 群的 IR 基的方法. 用第四章中所用的记号，可约张量(7-4)式表为

$$\Phi_a=p_a|\omega\rangle=p_a|i_1i_2\cdots i_f\rangle. \tag{7-74}$$

首先根据组态 $(m_1)^{f_1}(m_2)^{f_2}\cdots(m_n)^{f_n}$ 将 n^f 个基矢 (7-74) 分成不同的组. 每组中包含的状态数为

$$\mathscr{N}_{f_1f_2\cdots f_n}=f!/(f_1!f_2!\cdots f_n!). \tag{7-75a}$$

$$n^f=\sum_{f_1+f_2+\cdots+f_n=f}\mathscr{N}_{f_1f_2\cdots f_n}. \tag{7-75b}$$

然后对固定组态 $(m_1)^{f_1}\cdots(m_n)^{f_n}$，将 $\mathscr{N}_{f_1\cdots f_n}$ 个可约基 (7-74) 式进行约化. 又由于酉群 Gelfand 基就是置换群亚标准基，这样就把酉群问题转化到我们已经熟悉的置换群问题来处理. 由(7-74)式约化而来的每一个 IR 基都可唯一地用一个杨盘 $Y_m^{[\nu]}$ 和一个 Weyl 盘 $W_x^{[\nu]}$

标志

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_m,\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_{a=1}^{f_{f_1\cdots f_n}}u_{\nu m\varkappa;a}\Phi_a,\quad \begin{matrix}m=1,\ 2,\ \cdots,\ h_\nu(S_f)\\ \varkappa=1,\ 2,\ \cdots,\ \tau^\nu_{f_1f_2\cdots f_n}\end{matrix},\tag{7-76}$$

这里 $h_\nu(S_f)$ 和 $\tau^\nu_{f_1\cdots f_n}$ 分别为置换群 S_f 的 $IR(\nu)$ 的维数和它在组态 $(m_1)^{f_1}\cdots(m_n)^{f_n}$ 中出现的次数. (7-76)式满足本征方程(4-76)式或(4-77)式. 由本征方程可求出 $u_{\nu m\varkappa;a}$. (7-76)式在 S_f 群作用下只改变 Y_m

$$p\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_m,\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m'=1}^{h_\nu(S_f)}D^{[\nu]}_{m'm}(p)\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_{m'},\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle.\tag{7-77a}$$

在 $\mathscr{U}_n$ 群作用下,它只改变 Weyl 盘

$$\mathscr{E}_{\alpha\beta}\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_m,\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\varkappa'=1}^{h_\nu(\mathscr{U}_n)}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W_{\varkappa'}\end{matrix}\right|\mathscr{E}_{\alpha\beta}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_m,\ W_{\varkappa'}\end{matrix}\right\rangle.\tag{7-77b}$$

这里 $h_\nu(\mathscr{U}_n)$ 为 $\mathscr{U}_n$ 群 IR 的维数. 上式右边第一个因子为 Gelfand 矩阵元. 显然 $\mathscr{U}_n$ 群 $IR[\nu]$ 的维数和(7-76)式中的 $\tau^\nu_{f_1\cdots f_n}$ 的关系为

$$h_\nu(\mathscr{U}_n)=\sum_{f_1+f_2+\cdots+f_n=f}\tau^\nu_{f_1f_2\cdots f_n}.\tag{7-78}$$

所有的 IR 基总数仍为 n^f 个

$$n^f=\sum_\nu h_\nu(S_f)h_\nu(\mathscr{U}_n),\tag{7-79}$$

式中对 ν 求和时包括整数 f 的所有配分 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_f]$.

如果我们把 n^f 个 IR 基 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\Y_mW_\varkappa\end{matrix}\right\rangle$ 按 $IR[\nu]$ 在以 $W_\varkappa$ 为 x 轴, Y_m 为 y 轴的图上排成一个长方阵, 每一个 IR 基矢对应该图上一个点, 则该长方阵按 $[\nu]$ 分解成准对角形状, 每一个小长方块对应于 S_f 群和 $\mathscr{U}_n$ 群的 $IR[\nu]$, 其中的每一行构成 $\mathscr{U}_n$ 群的 IR 基, 共有 $h_\nu(S_f)$ 行, 表明 $\mathscr{U}_n$ 群的 $IR[\nu]$ 出现 $h_\nu(S_f)$ 次; 其中的每一列构成 S_f 群的标准基, 共有 $h_\nu(\mathscr{U}_n)$ 列, 意味着 S_f 群的 $IR[\nu]$ 出现 $h_\nu(\mathscr{U}_n)$ 次.

例如, 若粒子数 $f=3$, S_3 群和 $\mathscr{U}_3$ 群共有 $3^3=27$ 个 IR 基, 按上述方式排成的长方阵为:

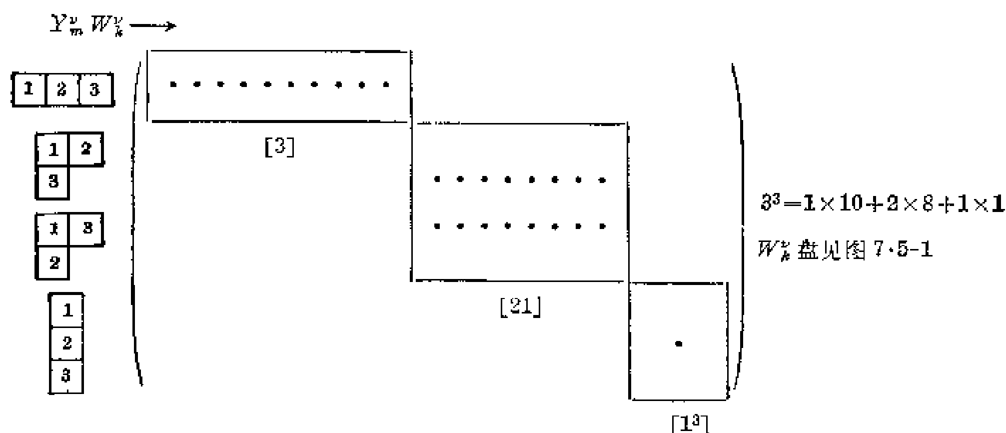


图 7.5-3　S_3 和 $S\mathscr{U}_3$ 的 IR 基

图 7.5-1 或图 7.5-3 所代表的 S_3 群和 $S\mathscr{U}_3$ 群的 27 个 IR 基的显示式我们在第三章中就已经给出了, 例如表 3.9 中取 $\alpha=u$, $\beta=d$, $\gamma=s$, 并结合图 7.5-1 就得到 Σ^{*0}, Σ^0 和 Λ^0 的波函数, 列在表 7.5-3.

表 7.5-3　重子 $S\mathscr{U}_3$ 波函数

ν, m, k		$\lvert uds\rangle$	$\lvert dus\rangle$	$\lvert sdu\rangle$	$\lvert usd\rangle$	$\lvert sud\rangle$	$\lvert dsu\rangle$
3, 1, 1	$\left\lvert \begin{array}{ccc}1&2&3\end{array}, \Sigma^{*0}\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$
0, 1, 1	$\left\lvert \begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}, \Sigma^0\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$
0, −1, 1	$\left\lvert \begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}, \Sigma^0\right\rangle$	0	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
0, 1, −1	$\left\lvert \begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}, \Lambda^0\right\rangle$	0	0	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$
0, −1, −1	$\left\lvert \begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}, \Lambda^0\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$	$-\frac{1}{\sqrt{12}}$
−3, −1, −1	$\left\lvert \begin{array}{c}1\\2\\3\end{array}, [0]\right\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$

令表 3.4 中的 (α, β) 分别为 (u, d), (u, s) 和 (d, s), 则由 (3-90) 式就可得到 P, Σ^+, Σ^- 的波函数, 见表 7.5-4. 类似地对 $(\alpha)(\beta)^2$ 组态, 将 § 3.4 习题 2 作同样代换就可得到 N, Ξ^0, Ξ^- 的波函数, 见表 7.5-5.

表 7.5-4

	$\lvert uud\rangle$	$\lvert udu\rangle$	$\lvert duu\rangle$
	$\lvert uus\rangle$	$\lvert usu\rangle$	$\lvert suu\rangle$
	$\lvert dds\rangle$	$\lvert dsd\rangle$	$\lvert sdd\rangle$
$\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}$; P, Σ^+, Σ^-	$\frac{2}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$
$\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}$; P, Σ^+, Σ^-	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

表 7.5-5

	$\lvert udd\rangle$	$\lvert dud\rangle$	$\lvert ddu\rangle$
	$\lvert uss\rangle$	$\lvert sus\rangle$	$\lvert ssu\rangle$
	$\lvert dss\rangle$	$\lvert sds\rangle$	$\lvert ssd\rangle$
$\begin{array}{cc}1&2\\3&\end{array}$: N, Ξ^0, Ξ^-	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{2}{\sqrt{6}}$
$\begin{array}{cc}1&3\\2&\end{array}$: N, Ξ^0, Ξ^-	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$	0

至于全对称表示[3], 它的波函数非常简单

$$\left| \begin{array}{ccc}1&2&3\end{array} \quad \begin{array}{ccc}\alpha&\alpha&\beta\end{array} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\alpha\alpha\beta\rangle + |\alpha\beta\alpha\rangle + |\beta\alpha\alpha\rangle). \tag{7-80}$$

令表 7.5-3 中 (u, d, s) 分别等于 (u, d, c), (u, s, c), (d, s, c), 令表 7.5-4 和表 7.5-5 中 (u, d) 分别等于 (u, c), (d, c), (s, c) 就得到 SU_4 群的波函数.

以上假定 f 个粒子的坐标均不相同, 如果允许粒子坐标可以相同, 则 S_f 群标准基 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ Y_m, W_\kappa\end{matrix}\right\rangle \to \left|\begin{matrix}[\nu]\\ W_m, W_\kappa\end{matrix}\right\rangle$, 这里 $W_m^{[\nu]}$ 为坐标空间 Weyl 盘, 它标志 S_f 群亚标准基(即 U_n 群 Gelfand 基). $[h_\nu(\mathscr{U}_n)]^2$ 个 U_n 群和 $\mathscr{U}_n$ 群的 IR 基 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W_m, W_\kappa\end{matrix}\right\rangle$ 在无穷小算符 E_{ij} 和 $\mathscr{E}_{\alpha\beta}$ 作

用下的变换性质为

$$E_{ij}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_m,\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m'=1}^{h_\nu(U_n)}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W_{m'}\end{matrix}\right|E_{ij}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_m\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_{m'},\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle, \tag{7-81a}$$

$$\mathscr{E}_{\alpha\beta}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_m,\ W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\varkappa'=1}^{h_\nu(U_n)}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W_{\varkappa'}\end{matrix}\right|\mathscr{E}_{\alpha\beta}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_\varkappa\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu]\\W_m,\ W_{\varkappa'}\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-81b}$$

由(7-81)式可知，原则上只要知道了$[h_\nu(\mathscr{U}_n)]^2$个IR基中的任何一个，就可通过E_{ij}和$\mathscr{E}_{\alpha\beta}$的作用，并利用 Gelfand 矩阵元，求出其余所有的基．但这种方法不如直接用本征函数法做方便．

从下节开始，我们主要讨论态空间酉群(当然也适用于坐标空间的酉群)，为了和文献上常用记号一致，采用U_n, SU_n代表态空间酉群．

习　　题

1．对$S\mathscr{U}_3$群的 10 维表示[3]，作出类似于表 7.5-2 那样的对照表．

2．若有 6 个夸克，处在$(u)^2(d)^2(s)^2$组态，问该组态中可能出现那些 Gelfand 基．写出对应的 Gelfand 记号．

§7.6　Contragredient 表示

§2.4已经讲过和群G的任一表示D相对应的另一个表示$\tilde{D}^{-1}$称为D的 contragredient 或共轭 (conjugate) 表示．如果D为幺正表示，则$\tilde{D}^{-1}=D^*$．可以证明，SU_n群IR $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]$的 contragredient 表示为$[\nu']=[\nu'_1\nu'_2\cdots\nu'_n]$，它和$[\nu]$的关系为

$$\nu'_1=\nu_1-\nu_n,\ \nu'_2=\nu_1-\nu_{n-1},\ \cdots,\ \nu'_p=\nu_1-\nu_{n-p+1},\cdots,\ \nu'_n=0. \tag{7-82}$$

(7-82)式意味着把杨图$[\nu]$和杨图$[\nu']$的倒置拼在一起，合成的杨图为$[\nu_1^n]$，即为SU_n群的恒等表示[0]．例如SU_5群$[\nu]=[43221]$的 contragredient 表示为$[\nu']=[3221]$，如下图所示．

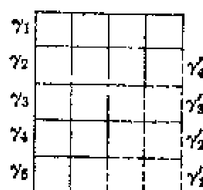


图 7.6　SU_5群不可约表示$[\nu]=[43221]$和其 contragredient 表示$[\nu']=[3221]$

对(7-82)式的一般证明见 Ellioltt 和 Dawber(1979)，我们这里，只讨论一个特例，$[\nu]=[1]$, $[\nu']=[1^{n-1}]$.

设$\varphi_{i_1}, \cdots, \varphi_{i_n}$为$SU_n$群$IR[1]$的基．$\psi^{i_1}, \cdots, \psi^{i_n}$为$SU_n$群$IR[1^{n-1}]$的基．反对称表示$[1^{n-1}]$的基可用一个行列式来代表

$$\psi^{i_1}=\sum_{i_2\cdots i_n}\epsilon^{i_1i_2\cdots i_n}\varphi_{i_2}\cdots\varphi_{i_n}. \tag{7-83}$$

在SU_n变换下

$$
\begin{aligned}
\psi^{i_1}\to\psi'^{i_1}&=\sum_{i_2\cdots i_n}\sum_{i'_2\cdots i'_n}\epsilon^{i_1i_2\cdots i_n}\mathscr{D}_{i_2i'_2}\cdots\mathscr{D}_{i_ni'_n}\varphi_{i'_2}\cdots\varphi_{i'_n}\\
&=\sum_{i'_1\cdots i'_n}M_{i'_1i_1}\epsilon^{i'_1i'_2\cdots i'_n}\varphi_{i'_2}\cdots\varphi_{i'_n}\\
&=\sum_{i'_1}(\mathscr{D}^{-1})_{i_1i'_1}\det(\mathscr{D})\,\psi^{i'_1}=\sum_{i'_1}(\widetilde{\mathscr{D}}^{-1})_{i'_1i_1}\psi^{i'_1},
\end{aligned}
\tag{7-84}
$$

式中 $M_{i'_1i_1}$ 为 $\det(\mathscr{D})$ 中 i'_1 行 i_1 列所对应的代数余因子．这里利用了

$$(\mathscr{D}^{-1})_{i_1i'_1}=M_{i'_1i_1}/\det(\mathscr{D}),\tag{7-85a}$$

$$M_{i'_1i_1}=\sum_{i_2\cdots i_n}\epsilon^{i_1i_2\cdots i_n}\epsilon^{i'_1i'_2\cdots i'_n}\mathscr{D}_{i_2i'_2}\cdots\mathscr{D}_{i_ni'_n}.\tag{7-85b}$$

由上式看到，SU_n 群 $IR[1^{n-1}]$ 的基 ψ^{i_1}, …, ψ^{i_n} 确实按 contragredient 表示 $\widetilde{\mathscr{D}}^{-1}$ 变换．

在原子或原子核物理中 $[\nu]=1$ 对应于单粒子态．$[1^n]$ 可看成满壳态，$[1^{n-1}]$ 为单空穴态．因此 $[\nu_1\nu_2\cdots\nu_n]$ 和其共轭表示 $[\nu'_1\nu'_2\cdots\nu'_n]$ 之间的关系就是粒子-空穴共轭关系．

若 $[\nu]=[\nu_1\nu_2\cdots]$ 满足条件

$$\nu_p+\nu_{n-p+1}=\nu_1,\quad p=1,\ 2,\ \cdots,\ n,\tag{7-86}$$

则 $[\nu']=[\nu]$，即 $IR[\nu]$ 和它的 contragradient 表示等价．如 SU_5 群

$[\nu]=[\nu']=[4321]$，　$[\nu]=[\nu']=[4222]$　$[\nu]=[\nu']=[2111]$

容易看到，SU_n 群伴随表示(adjoint 表示) $[\nu_0]=[21^{n-2}]$ 满足条件(7-86)式，于是 $D^{[\nu_0]}=D^{[\nu'_0]}=(\widetilde{D}^{[\nu_0]})^{-1}=(D^{[\nu_0]})^*$．即伴随表示必等价于一实表示．例如 SU_2 群伴随表示 $[\nu_0]=[2]$（对应于 $J=1$）和实表示 $\mathscr{D}(\alpha\beta\gamma)$ [(5-34)式] 等价．

由(7-82)式容易看到，SU_3 群 $IR(\lambda\mu)$ 的 contragredient 表示为 $(\mu\lambda)$．

§7.7　SU_n 群的 CG 系数

设 $[\nu_1]$ 和 $[\nu_2]$ 为 SU_n 群的两个不可约表示，它们的 CG 序列记成

$$[\nu_1]\times[\nu_2]=\sum_{\nu}\{\nu_1\nu_2\nu\}[\nu].\tag{7-87}$$

利用 SU_n 群 CG 系数 $C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}$ 可把两套 IR 基耦合成 SU_n 群的另一个 IR 基 $\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\ W\end{matrix}\right\rangle$:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\ W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{W_1W_2}C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ W_2\end{matrix}\right\rangle,\tag{7-88a}$$

$$\tau=1,\ 2,\ \cdots,\ \{\nu_1\nu_2\nu\},$$

这里 W_1, W_2 和 W 为分量指标．

SU_n 群 CG 系数满足幺正性：

$$\sum_{W_1W_2}C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}C^{\nu'_{\tau'}W'}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{WW'}\tag{7-89a}$$

$$\sum_{\nu\tau W}C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W'_1,\nu_2W'_2}=\delta_{W_1W'_1}\delta_{W_2W'_2}.\tag{7-89b}$$

(7-88a)式的逆展开为

$$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\nu\tau W}C^{\nu_\tau W}_{\nu_1 W_1,\nu_2 W_2}\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\W\end{matrix}\right\rangle \tag{7-88b}$$

1. SU_n 群 CG 系数和置换群 ORC

SU_n 群 CG 系数和我们所选的分类基有关，本节限于讨论 SU_n 群 Gelfand 基的 CG 系数. SU_n 群其它分类基的 CG 系数见 § 7.13.

SU_2 群的 CG 系数早已由 Wigner 解决了，这就是大家熟知的角动量耦合系数. SU_n 群($n\geqslant3$)的 CG 系数基本上都采用 Racah 的无穷小算符方法计算，这种方法需要按逐个 n 计算. 至今只有 SU_3 群的 CG 系数较全(de Swart). 最近 Haacke 等计算了 SU_4 群的部分 CG 系数，Biedenharn, Giovannini 和 Louck (1967) 讨论了 U_n 群 CG 系数的正则定义(canonical definition). 下面介绍利用置换群 ORC 同时求出任意 SU_n 群的 CG 系数的方法.

(1) Weyl 盘中单粒子态全不相同的情形

§ 4.14 中我们讨论置换群外积是针对坐标置换群 S_f 进行的，现在我们把外积问题推广到态置换群 $\mathscr{S}_f$. 首先假定 f 个单粒子态全不相同，这时 S_f 和 $\mathscr{S}_f$ 两个群是完全对等的，只要把粒子坐标编码看作单粒子态的编码，置换群标准基 $|Y^{[\nu]_\tau}_m(\omega^0)\rangle$ 和 $|Y^{[\nu_i]}_{m_i}(\omega_i)\rangle$ 就变成了 SU_f 群的 Gelfand 基 $\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\W\end{matrix}\right\rangle$ 和 $\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\W_i\end{matrix}\right\rangle$，于是(4-142a)式可写成

$$\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_1\omega_1 m_2\omega_2}C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_1\omega_1,\nu_2 m_2\omega_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-90}$$

比较(7-88a)式和(7-90)式得

$$C^{\nu_\tau m}_{\nu_1 m_1\omega_1,\nu_2 m_2\omega_2}=C^{\nu_\tau W}_{\nu_1 W_1,\nu_2 W_2}. \tag{7-91}$$

这里杨盘 $Y^{\nu_1}_{m_1}(\omega_1)$, $Y^{\nu_2}_{m_2}(\omega_2)$ 和 Y^{ν}_m 被看成了 Weyl 盘 W_1, W_2 和 W. 因此 S_f 群 ORC 就是 SU_f 群单粒子态全不相同的 Gelfand 基的 CG 系数. 所以 ORC 表同时又是 SU_f 群 CG 系数表. 此外，如果进一步再作些简单的指标代换，还可得到任意 $n(n\geqslant f)$ 的 SU_n 群 CG 系数. 假定有 n 个粒子态 α, β, γ, $\cdots$, δ, 它们构成 SU_n 群的基本表示，规定态的顺序为 $\alpha<\beta<\gamma<\cdots<\delta$. 只要对 $S_f\,(f\leqslant n)$ 群 ORC 表头中杨盘 $Y^{[\nu]}_m$, $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$ 和 $Y^{[\nu_2]}_{m_2}$ 内的粒子坐标编码作如下代换

$$(1,\ 2,\ \cdots,\ f)\to(i_1,\ i_2,\ \cdots,\ i_f),\quad 即\ 1\to i_1,\ 2\to i_2,\ \cdots,\ f\to i_f,$$

这里 $i_1i_2\cdots i_f$ 为从 n 个态 α、β、γ、$\cdots$、δ 中任选的 f 个态，它们的态序满足 $i_1<i_2<\cdots<i_f$, 就可由 ORC 表得到一系列 SU_n 群 CG 系数表. 例如 $n=6$, α、β、γ、δ、ϵ、φ 为六个单粒子态，对 S_4 群表 4.17 中每一个 ORC 表的粒子坐标编码作如下代换，就可得到 $\binom{6}{4}=15$ 个 SU_6 CG 系数表.

$$\begin{aligned}(1234)\to&(\alpha\beta\gamma\delta),\ (\alpha\beta\gamma\epsilon),\ (\alpha\beta\gamma\varphi),\ (\alpha\beta\delta\epsilon),\ (\alpha\beta\delta\varphi),\\&(\alpha\beta\epsilon\varphi),\ (\alpha\gamma\delta\epsilon),\ (\alpha\gamma\delta\varphi),\ (\alpha\gamma\epsilon\varphi),\ (\alpha\delta\epsilon\varphi),\\&(\beta\gamma\delta\epsilon),\ (\beta\gamma\delta\varphi),\ (\beta\gamma\epsilon\varphi),\ (\beta\delta\epsilon\varphi),\ (\gamma\delta\epsilon\varphi).\end{aligned}$$

由此可见，只要将 ORC 表头中杨盘内的指标作些简单代换，每一个 ORC 表都可给出无穷多个同类型的 SU_n 群 CG 系数表.

(2) W 盘中单粒子态有相同的情形

如果在(4-142a)式中令坐标编码

$$
\begin{gathered}
(12\cdots f)\to(i_1i_2\cdots i_f),\quad i_1\leqslant i_2\leqslant\cdots\leqslant i_f,\\
(\omega^0)\to(\bar{\omega}^0)=(i_1i_2\cdots i_f),\ (\omega_1)=(a_1\cdots a_{f_1})\to(\bar{\omega}_1)=(i_{a_1}\cdots i_{a_{f_1}}),\\
(\omega_2)=(a_{f_1+1}\cdots a_f)\to(\bar{\omega}_2)=(i_{a_{f_1+1}}\cdots i_{a_f}),
\end{gathered}\tag{7-92}
$$

则正序列(ω^0)就变到正序态$|\bar{\omega}^0\rangle$，正序列(ω_i)变到正序态$|\bar{\omega}_i\rangle$. 现在单粒子态$(i_1i_2\cdots i_f)$允许有重复,这时(4-142a)式仍然成立,证明如下:

先把(4-142a)式改写成用投影算符表示的形式:

$$
\mathring{P}^{[\nu]_\tau m}|\bar{\omega}^0\rangle=\sum_{\substack{m_1m_2\\ \omega_1\omega_2}}C^{\nu_\tau m}_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}Q_\omega\mathring{P}^{[\nu_1]m_1}|i_1\cdots i_{f_1}\rangle\mathring{P}^{[\nu_2]m_2}|i_{f_1+1}\cdots i_f\rangle.\tag{7-93a}
$$

单粒子态没有重复时，此式就是(7-90)式. 因投影算符只作用于坐标编码，(7-93a)式显然在单粒子态有重复时,仍然成立,即我们仍有

$$
|Y^{[\nu]_\tau}_m(\bar{\omega}^0)\rangle=\sum_{\substack{m_1\omega_1\\ m_2\omega_2}}C^{\nu_\tau m}_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}|Y^{[\nu_1]}_{m_1}(\bar{\omega}_1)\rangle|Y^{[\nu_2]}_{m_2}(\bar{\omega}_2)\rangle.\tag{7-93b}
$$

当单粒子态有重复时$|Y^{[\nu]_\tau}_m(\bar{\omega}^0)\rangle$和$|Y^{[\nu_i]}_{m_i}(\bar{\omega}_i)\rangle$是不归一的$SU_n$群Gelfand基. 由(4-81a)式和(4-86)式得

$$
|Y^{[\nu]}_m(\bar{\omega}^0)\rangle=R^{[\nu]m}(\bar{\omega}^0)\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle\tag{7-94a}
$$

$$
|Y^{[\nu_i]}_{m_i}(\bar{\omega}_i)\rangle=R^{[\nu_i]m_i}(\bar{\omega}_i)\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\ W_i\end{matrix}\right\rangle\tag{7-94b}
$$

还要指出,在态指标有重复时,可能有几个不同的m值对应同一个W盘,可能有几个不同的$m_i\bar{\omega}_i$对应同一个W_i盘. 当W和W_i盘中同一列出现相同单粒子态时

$$
\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\ W\end{matrix}\right\rangle=0,\quad\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\ W_i\end{matrix}\right\rangle=0.
$$

将(7-94)式代入(7-93)式，再根据SU_n群CG系数的定义(7-88)式,就得到SU_n群CG系数和置换群ORC的普遍关系

$$
C^{\nu_\tau W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}=\frac{1}{R^{[\nu]m}(\bar{\omega}^0)}\sum_{\substack{m_1m_2\\ \omega_1\omega_2}}{}' R^{[\nu_1]m_1}(\bar{\omega}_1)R^{[\nu_2]m_2}(\bar{\omega}_2)C^{\nu_\tau m}_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}\tag{7-95}
$$

式中带撇求和号表示只对能给出同一W_i盘的$m_i\omega_i$求和. $(\bar{\omega}^0)$, $(\bar{\omega}_i)$和(ω^0), (ω_i)的对应关系由(7-92)式指定. 当单粒子态全不相同时,一种$(m_i\bar{\omega}_i)$唯一对应一个W_i盘. 于是(7-95)式的求和号中只剩一项，且这时所有比例系数$R^{[\nu]m}(\bar{\omega}^0)$, $R^{[\nu_i]m_i}(\omega_i)$都等于1，于是(7-95)式就退化到特殊情形(7-91)式.

由此得出一个重要结论，求出了置换群ORC后，只要附加计算一些通用的比例系数$R^{[\nu]m}(\bar{\omega})$等,就可利用(7-95)式同时求出所有SU_n群CG系数,而不必象通常计算CG系数的方法那样逐个n地分别计算.

注意(7-95)式左方和量子数m无关，在计算CG系数时可取满足(7-94a)的任一m值. (7-95)式右方和m无关的原因在于对应同一Weyl盘而m不同的投影基

$$
|Y^{[\nu]}_m(\bar{\omega}^0)\rangle=\mathring{P}^{[\nu]m}|\bar{\omega}^0\rangle=R^{[\nu]m}(\bar{\omega}^0)\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle\tag{7-96a}
$$

之间只差一个正的倍数,现证明如下:

先假定正序态$|\overline{\omega}^0\rangle$中只有处在第 i 和 $i+1$ 位置上的态指标相同，因此

$$p_{i,i+1}|\overline{\omega}^0\rangle=|\overline{\omega}^0\rangle. \tag{7-96b}$$

再假定杨盘 $Y_m^{[\nu]}$ 中，i 和 $i+1$ 不在同一行或同一列[1)]，令 $Y_{m'}^{[\nu]}=p_{i,i+1}Y_m^{[\nu]}$，利用(3-199b)式、(4-17)式和(7-96b)式得

$$\mathring{P}^{[\nu]m}|\overline{\omega}^0\rangle=\mathring{P}^{[\nu]m}p_{i,i+1}|\overline{\omega}^0\rangle=[D_{mm'}^{(\nu)}(i,\ i+1)\mathring{P}^{[\nu]m'}+D_{mm}^{(\nu)}(i,\ i+1)\mathring{P}^{[\nu]m}]|\overline{\omega}^0\rangle.$$

$$\therefore\quad |Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle=\frac{D_{mm'}^{(\nu)}(i,\ i+1)}{1-D_{mm}^{(\nu)}(i,\ i+1)}|Y_{m'}^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle. \tag{7-97}$$

因为根据(4-14)式可知，$1>D_{mm'}^{(\nu)}(i,\ i+1)>0$，所以(7-97)式中比例系数永为正数．以上证明容易推广到一般情形．例如若正序态$|\overline{\omega}^0\rangle$中第 $i-1$，i，$i+1$ 位置上有三个相同的态指标，并假定 Y_m^ν，$Y_{m'}^\nu$ 和 $Y_{m''}^\nu$ 满足

$$Y_{m''}^\nu=p_{i-1,i}Y_{m'}^\nu,\quad Y_{m'}^\nu=p_{i,i+1}Y_m^\nu, \tag{7-98}$$

则根据(7-97)式可知$|Y_{m''}^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle$、$|Y_{m'}^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle$和$|Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle$都只相差一个正的倍数．

由此可知(7-94)式中的比例系数 $R^{[\nu]m}(\overline{\omega}^0)$必为同号，我们全取为正数．比例系数的计算公式见(4-81b)式，S_5 以内的表格见表 4·8．在利用(7-95)式求 SU_n 群 CG 系数时，比例系数 $R^{[\nu]m}(\overline{\omega}_0)$可以不必知道．因它恒为正数，因此可利用 SU_n 群 CG 系数的归一性把它定下来．

(7-95)式给出 SU_n 群 CG 系数和置换群 ORC 的关系，同时也就给出了 SU_n 群直乘表示的约化规则，即 SU_n 群 CG 序列问题．根据§7.5 第 2 小节，SU_n 群的 $IR[\nu]$ 所对应的杨图的行数只能小于或等于 n，因此 SU_n 群两个 $IR[\nu_1]$ 和 $[\nu_2]$ 的乘积中所包含的 SU_n 群 $IR[\nu]$ 由置换群外积约化规则决定，但要去掉行数大于 n 的那些杨图$[\nu]$，及长度为 n 的整列．

例如由置换群外积约化规则(4-137)式得到 U_3 和 SU_3 群$[21]\times[21]$的 CG 序列为

U_3: $[21]\times[21]=[42]+[411]+[33]+2[321]+[222]$,

SU_3: $[21]\times[21]=[42]+[3]+[33]+2[21]+[0]$,

维数检查[2)]: $8\times8=27+10+10+2\times8+1$.

类似地可得到 SU_4 群的 CG 序列为

SU_4: $[21]\times[21]=[42]+[411]+[33]+2[321]+[222]+[2]+[11]$

维数检查: $20\times20=126+70+50+2\times64+10+10+6$.

2. SU_n 群 CG 系数的计算步骤

由 ORC 计算 SU_n 群 CG 系数的步骤简述如下:

(1) 定出典型的正序态$(\overline{\omega}^0)$

设 α, β, γ, $\delta\cdots\epsilon$ 构成 SU_n 群基本表示的基，规定态的顺序为 $\alpha<\beta<\gamma<\cdots<\epsilon$．一共有$\binom{n+f-1}{f}$种正序态$|\overline{\omega}^0\rangle=|i_1i_2\cdots i_f\rangle$，$i=\alpha,\ \beta,\ \gamma,\ \delta,\ \cdots,\ \epsilon$．从中选出少数典型的正序态计算，其它情形均可从此典型 CG 系数作某些指标代换得到．例如 $f=4$，$n=4$，共有

1) 若 i, $i+1$ 处在同一行，则$\left|\begin{matrix}[\nu]\\W\end{matrix}\right\rangle$唯一对应一个$|Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle$．如果 i, $i+1$ 处在同一列，则$|Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\rangle=0$，因这时同一列内出现两个相同的态指标．

2) 维数表见书末表 A1．

$\binom{n+f-1}{f}=35$ 种正序态,典型的只有以下八种:

$$|\alpha\beta\gamma\delta\rangle,\ |\alpha\alpha\beta\gamma\rangle,\ |\alpha\beta\beta\gamma\rangle,\ |\alpha\beta\gamma\gamma\rangle,\ |\alpha\alpha\beta\beta\rangle,\ |\alpha\alpha\alpha\beta\rangle,\ |\alpha\beta\beta\beta\rangle,\ |\alpha\alpha\alpha\alpha\rangle.$$

第一种情形的 CG 系数就是 ORC; 最后一种情形的 CG 系数一看便知,不必计算; 第五、六、七这三种情形的 CG 系数就是通常的 SU_2 群的 CG 系数,可以查表得到,也不必计算. 因此只剩下三种正序态 $|\overline{\omega}^0\rangle=|\alpha\alpha\beta\gamma\rangle$、$|\alpha\beta\beta\gamma\rangle$和$|\alpha\beta\gamma\gamma\rangle$需要计算它们的 CG 系数.

给出了上述典型情况下的 CG 系数后, 再作些简单的指标代换, 就可给出 $f=4$ 而 n 为任意的 SU_n 群 CG 系数. 例如令正序态

$$|\overline{\omega}^0\rangle=|\alpha\beta\gamma\delta\rangle=|1234\rangle,\ |1235\rangle,\ |1245\rangle,\ |1345\rangle,\ |2345\rangle,$$

$$|\overline{\omega}^0\rangle=|\alpha\alpha\beta\gamma\rangle=|1123\rangle,\ |1124\rangle,\ |2234\rangle,\ |1125\rangle,\ |1135\rangle,$$
$$|1145\rangle,\ |2235\rangle,\ |2245\rangle,\ |3345\rangle.$$

....

就可给出 SU_5 群 CG 系数. 由此可见, 每一个 SU_n 群 CG 系数表实际上都对应于无穷多个同类型的 CG 系数表.

(2) 更换 ORC 的表头

令 ORC 表头杨盘内的指标 $1\to i_1,\ 2\to i_2,\ \cdots,\ f\to i_f$, 于是杨盘就变成了 Weyl 盘.

$$Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)\to W,\quad Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\overline{\omega}_i)\to W_i. \tag{7-99}$$

(3) 将 ORC 表中第$[\nu]m$行系数除以 $R^{[\nu]m}(\overline{\omega}^0)$,第 $m_1\overline{\omega}_1m_2\overline{\omega}_2$ 列的系数乘以 $R^{[\nu_1]m_1}(\overline{\omega}_1)R^{[\nu_2]m_2}(\overline{\omega}_2)$.

(4) 将属于同一表头$(W_1,\ W_2)$的系数相加(即完成(7-95)式中的求和)就得到 SU_n 群 CG 系数表.

例如 S_3 群 $[2]\otimes[1]$ ORC 表 7·7-1a 中(取自表 4.17-2), 令 $(\overline{\omega}_0)=(\alpha\alpha\beta)$, 即 $1\to\alpha$, $2\to\alpha$, $3\to\beta$, 这时表 7.7-1a 中的杨盘就变到了表 7·7-1b 中的 W 盘,该表第三行 W 盘中两

表 7.7-1a $S_3[2]\otimes[1]$ORC

	[1 2] [3]	[1 3] [2]	[2 3] [1]
[1 2 3]	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$
[1 2 / 3]	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$
[1 3 / 2]	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}$

表 7.7-1b 中间过程

	[α α] [β]	[α β] [α]	[α β] [α]
[α α β]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$
[α α / β]	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$
[α β / α]			

表 7.7-1c SU_2 CG 系数

	[α α] [β]	[α β] [α]
[α α β]	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$
[α α / β]	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$

个 α 处于同一列, $\left|\begin{smallmatrix}\alpha & \beta \\ \alpha & \end{smallmatrix}\right\rangle \equiv 0$. 将表 7.7-1a 中第一、二行分别除以 $R^{[3]}(\alpha\alpha\beta)=\sqrt{2}$ 和 $R^{[21]1}(\alpha\alpha\beta)=\sqrt{2}$(见表 4.8-1), 第一、二、三列分别乘以 $R^{[2]}(\alpha\alpha)=\sqrt{2}$、$R^{[2]}(\alpha\beta)=1$、$R^{[2]}(\alpha\beta)=1$, 就得到表 7.7-1b. 再将 7.7-1b 中属于同一表头的第二、三列相加就得到 SU_2 群 CG 系数表 7.7-1c.

再如由表 4.17-3d [21]⊗[1]ORC, 可得到以下 SU_3 群 CG 系数表(更多的例子见文献[6]).

表 7.7-2 [21]×[1] $SU_n CG$ 系数表

[21]⊗[1]

	$\alpha\alpha$ β, γ	$\alpha\alpha$ γ, β	$\alpha\beta$ γ, α	$\alpha\gamma$ β, α
$\alpha\alpha\beta$ γ	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0
$\alpha\alpha\gamma$ β	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{48}}$	$\frac{3}{4}$
$\alpha\alpha$ β γ	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{1}{4}$
$\alpha\alpha$ $\beta\gamma$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}$

[21]⊗[1]

	$\alpha\beta$ β, γ	$\alpha\beta$ γ, β	$\beta\beta$ γ, α	$\alpha\gamma$ β, β
$\alpha\beta\beta$ γ	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	0
$\alpha\beta\gamma$ β	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{48}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\frac{3}{4}$
$\alpha\beta$ β γ	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$-\frac{1}{4}$
$\alpha\beta$ $\beta\gamma$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}$

[21]⊗[1]

	$\alpha\beta$ γ, γ	$\alpha\gamma$ β, γ	$\alpha\gamma$ γ, β	$\beta\gamma$ γ, α
$\alpha\beta\gamma$ γ	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
$\alpha\gamma\gamma$ β	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$
$\alpha\gamma$ β γ	0	$\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{3}{8}}$
$\alpha\beta$ $\gamma\gamma$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$

3. 位相约定

(1) ORC 和 CG 系数的相对位相

对 ORC, 同一 $IR[\nu]$ 的各 m 分量间的相对位相取置换群 Young-Yamanouchi 标准位相, 这样就保证了由(7-95)式导出的 SU_n 群 CG 系数满足 Gelfand-Biedenharn 位相约定, 即 SU_n 群无穷小算符 $E_{i,i-1}(i=n, n-1, \cdots, 2)$的矩阵元永远大于或等于零.

(2) 绝对位相

我们取 Baird-Biedenharn 位相约定, 即要求最高权 $(HW)CG$ 系数

$$C^{\nu_t,HW}_{\nu_1 HW_1,\nu_2 W_2}>0. \tag{7-100}$$

杨图$[\nu]$($[\nu_1]$)中第一行全填入 1 (或 α), 第二行全填入 2 (或 β)…所得到的态, 定为最高权态 $|[\nu]HW\rangle$($|[\nu_i]HW_i\rangle$). 位相约定 (7-100)式是 SU_2 群 CG 系数的 Condon-Shortley 位相约定的推广.

由于(7-95)式, SU_n 群 CG 系数的绝对位相约定规定了置换群 ORC 的绝对位相, 反之

亦然．在第四章我们对 ORC 的绝对位相作了(4-148)式的约定，就是为了使得由 ORC 导出的 SU_n 群 CG 系数满足位相约定(7-100)式．

由(7-95)式和(4-153a)式可知，SU_n 群 CG 系数满足对称性

$$C^{\nu_3,W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}=\epsilon_1C^{\nu_3,W}_{\nu_2W_2,\nu_1W_1}. \tag{7-101}$$

位相因子 ϵ_1 由(4-153b)式给出，ϵ_1 的数值表见书末附录表 A2.

习　　题

1. 作出 SU_3 群$[31]\times[21]$的 CG 序列.
2. 将4-夸克态$\left|\begin{matrix}uus\\d\end{matrix}\right\rangle$表成 P, Σ^+, Σ^0, Λ^0 和单夸克态的乘积的线性组合.
3. 将表 7.7-2 中用 Weyl 盘标志 IR 基分量改为用 II, Y 标志.

§7.8　SU_n 群 CG 系数和 $S_f\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ 分类基

(7-88a)式的 IR 基中我们只考虑了 Weyl 盘，现在要同时考虑杨盘和 Weyl 盘．令

$$\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\m_i\omega_i^0,\ W_i\end{matrix}\right\rangle=|Y^{[\nu_i]}_{m_i}(\omega_i^0),\ W_i\rangle, \tag{7-102a}$$

$$(\omega_1^0)=(1,\ 2,\ \cdots,\ f_1),\quad(\omega_2^0)=(f_1+1,\ \cdots,\ f_1+f_2),$$

为 $S_{f_i}(\omega_i^0)$ 群(以下简称为 S_{f_i} 群) Yamanouchi 基 $[\nu_i]m_i$ 和 SU_n 群 IR 基 $[\nu_i]W_i$. 根据(7-88a)式，用 SU_n 群 CG 系数将(7-102a)式组合成 SU_n 群 IR 基$[\nu]W$:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\\theta[\nu_1]m_1[\nu_2]m_2,\ W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{W_1W_2}C^{[\nu]\theta,W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-102b}$$

上式为 SU_n 群 CSCO-I $\mathscr{I}^{(n)}_k$ 的本征函数，根据(7-37)式，它也是 $S_{f_1+f_2}$ 群 CSCO-I $C(f_1+f_2)$ 的本征函数，因此上式必属于 $S_{f_1+f_2}$ 群 $IR[\nu]$. 此外由于上式右边量子数 $[\nu_1]m_1[\nu_2]m_2$ 为固定，仅仅对 W_1W_2 求和，所以组合后仍为 S_{f_1} 的 IR 基$[\nu_1]m_1$ 和 S_{f_2} 的 IR 基$[\nu_2]m_2$. 因此(7-102b)式是置换群 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ 分类基和 SU_n IR 基$[\nu]W$. 由此得到一个结论：*酉群 CG 系数是 S_{f_1} 和 S_{f_2} 的 IR 基耦合成 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ 分类基的耦合系数.*

利用(4-168b)式，可将置换群非标准基(7-102b)式转换成 $S_{f_1+f_2}$ 群的 Yamanouchi 基

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\m,\ W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\nu_2m_2\theta W_1W_2}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\m\end{matrix}\right|[\nu],\ \begin{matrix}\theta[\nu_1]\,[\nu_2]\\m_1\quad m_2\end{matrix}\right\rangle C^{[\nu]\theta,W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-102c}$$

§7.9　$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基

1. 置换群 CG 系数和 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基

物理上经常把一个粒子所处的空间拆成几部分．例如对核子可拆成普通坐标空间 V^x、自旋空间 V^σ 和同位旋空间 V^τ. 若核子轨道角动量为 l, 则空间 V^x 中有 $2l+1$ 个态，V^σ 和 V^τ 中各有两个态．单个核子总共可能有 $n=(2l+1)\cdot2\cdot2=4(2l+1)$ 个可能的状态．我们可把多核子系统的波函数按 $SU_n\supset U_{n-1}\supset\cdots\supset U_2\supset U_1$ IR 分类，即取 SU_n 群 Gelfand 基作为基底．但显然物理上需要的不是这种分类基，而是希望构造一个具有确定空间对称性

$[\nu]$，确定自旋 S，确定同位旋 T 的波函数，即要求 $SU_{4(2l+1)}\supset SU_{2l+1}\times SU_2^S\times SU_2^T$ 分类基，因为在很多情况下 $[\nu]$，S，T 是好量子数(例如核力为 Serber[1]时)．本节给出构造这种分类基的普遍方法．先考虑两种自由度即 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基，如原子核中 $SU_4\supset SU_2^{(\sigma)}\times SU_2^{(\tau)}$，基本粒子中 $SU_6\supset SU_3^{(f)}\times SU_2^{(\sigma)}$ 或 $SU_8\supset SU_4^{(f)}\times SU_2^{(\sigma)}$，这里 f 代表味空间．

考虑下面三种 f 个粒子的单粒子乘积态：

$$x\text{ 空间}\qquad \varphi=\varphi_{i_1}(x_1)\cdots\varphi_{i_f}(x_f),\ i_1\cdots i_f=1,\ 2,\ \cdots,\ m, \tag{7-103a}$$

$$\xi\text{ 空间}\qquad \chi=\chi_{\alpha_1}(\xi_1)\cdots\chi_{\alpha_f}(\xi_f),\ \alpha_1\cdots\alpha_f=1,\ 2,\ \cdots,\ n \tag{7-103b}$$

$$q\text{ 空间}\qquad \psi=\psi_{s_1}(q_1)\cdots\psi_{s_f}(q_f),\ s=(i\alpha)=(1,\ 1)(1,\ 2)\cdots(1,\ n),(2,\ 1),\ \cdots,\ (m,\ n) \tag{7-103c}$$

这里 x、ξ 为同一个粒子的两部分坐标，例如 x 代表同位旋空间或味空间坐标，ξ 代表自旋坐标等

$$q=(x,\ \xi),\quad \psi_s(q)=\varphi_i(x)\chi_\alpha(\xi).$$

$$\begin{pmatrix}\varphi_1\cdots\varphi_m\\ \chi_1\cdots\chi_n\\ \psi_{1,1}\cdots\psi_{m,n}\end{pmatrix}\text{荷载}\begin{pmatrix}SU_m\\ SU_n\\ SU_{mn}\end{pmatrix}\text{的基本表示.}$$

这里为了避免使用迭句，用了显见的缩写记号．例如基本粒子 SU_6 模型中，χ 代表味空间，φ_1，φ_2，φ_3 分别代表三种层子态 u，d，s；ξ 为自旋空间，χ_1，χ_2 分别代表自旋朝上，朝下态 χ_α，χ_β．于是 q 空间中 $s=(u\alpha)$，$(u\beta)$，$(d\alpha)$，$(d\beta)$，$(s\alpha)$，$(s\beta)$ 构成 SU_6 群的基本表示．

SU_m，SU_n 和 SU_{mn} 群元分别由以下酉矩阵所构成

$$U_{ij}(a^1\cdots a^{r_m}),\ U_{\alpha\beta}(b^1\cdots b^{r_n}),\ U_{i\alpha,j\beta}(c^1\cdots c^r), \tag{7-104a}$$

$$r_m=m^2-1,\quad r_n=n^2-1,\quad r=(mn)^2-1,$$

式中 r_m，r_n，r 分别为这三个群的阶．U_{ij}，$U_{\alpha\beta}$，$U_{i\alpha,j\beta}$ 分别为 $m\times m$，$n\times n$，$mn\times mn$ 矩阵．$SU_m\times SU_n$ 群元则由酉矩阵

$$U_{i\alpha,j\beta}(a^1\cdots a^{r_m},\ b^1\cdots b^{r_n})=U_{ij}(a^1\cdots a^{r_m})U_{\alpha\beta}(b^1\cdots b^{r_n}) \tag{7-104b}$$

所组成，阶为 $r_m+r_n=m^2+n^2-2$，显然 $SU_m\times SU_n$ 为 SU_{mn} 群的一个子群．

$$f\text{-粒子乘积态}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\\ \psi\end{pmatrix}\text{构成置换群}\begin{pmatrix}S_f(x)\\ S_f(\xi)\\ S_f(q)\end{pmatrix}\text{和酉群}\begin{pmatrix}SU_m\\ SU_n\\ SU_{mn}\end{pmatrix}\text{的可约基．假定}$$

$$\varphi_{m_1}^{[\nu_1]}(x,\ W_1)=\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1,\ W_1\end{matrix}\right\rangle\ \text{为}\ \begin{matrix}S_f(x)\text{ 群的标准基}([\nu_1]m_1)\text{和}\\ SU_m\text{ 群的 }IR\text{ 基}([\nu_1]W_1).\end{matrix} \tag{7-105a}$$

$$\chi_{m_2}^{[\nu_2]}(\xi,\ W_2)=\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2,\ W_2\end{matrix}\right\rangle\ \text{为}\ \begin{matrix}S_f(\xi)\text{群的标准基}([\nu_2]m_2)\text{和}\\ SU_n\text{ 群的 }IR\text{ 基}([\nu_2]W_2).\end{matrix} \tag{7-105b}$$

式中 W_1 和 W_2 分别为 SU_m 和 SU_n 群不可约表示的分量指标．以下讨论和 SU_m、SU_n 具体取那种 IR 基无关，但为明确起见，假定 SU_m 和 SU_n 均取 Gelfand 基，于是 W_1、W_2 代表 Weyl 盘，分别填以态指标 $i_1i_2\cdots i_f$ 和 $\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_f$．例如

1) 即相互作用可写成以下形式：$V_{ij}=v(r_{ij})(W+M^x p_{ij})$，$W$、$M$ 为常数，${}^x p_{ij}$ 为坐标空间交换算符．

$$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1=1,\ W_1\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u & d\\ \hline s & \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_1=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2\\ \hline 3 & \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline u & d\\ \hline s & \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle,$$

$$\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2=2,\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \alpha\\ \hline \beta & \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_2=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3\\ \hline 2 & \\ \cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \alpha\\ \hline \beta & \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle. \tag{7-105c}$$

式中$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1W_1\end{matrix}\right\rangle$和$\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2W_2\end{matrix}\right\rangle$可分别表为乘积态$\varphi$和$\chi$的线性组合.

由(3-37)式知SU_m和SU_n的IR基之积$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ W_2\end{matrix}\right\rangle$也就是直积群$SU_m\times SU_n$的$IR$基.

利用置换群CG系数,可将(7-105)式耦合成$S_f(q)$的标准基$(\nu_\beta m)$.

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta[\nu_1]W_1[\nu_2]W_2\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[\nu]\ \beta[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m,\quad W_1\ \ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_1m_2}C^{\nu_\beta m}_{\nu_1m_1,\,\nu_2m_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2W_2\end{matrix}\right\rangle,$$

$$\beta=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu_1\nu_2\nu). \tag{7-106a}$$

现在证明上式为SU_{mn}群$[\nu]$表示的不可约基. 根据置换群CG系数的定义,(7-106a)式为$S_f(q)$群CSCO-I $C(f)$的本征函数. 由(7-37)式可知,对(7-103c)式的基来说,SU_{mn}群的不变算符集$I_k^{(mn)}$为$C(f)$的函数

$$I_k^{(mn)}=F_k^{(mn)}(C(f)),\quad k=mn,\ \cdots,\ 3,\ 2. \tag{7-107}$$

另一方面,(7-106a)式又必定是(7-103c)的线性组合,所以对(7-106a)式的基而言,(7-107)式仍成立. 因此(7-106a)式必定是SU_{mn}群CSCO-I $\{I_k^{(mn)}\}$的本征函数,故(7-106a)属于SU_{mn}群$[\nu]$不可约表示.又由于(7-106a)式右边ν_1W_1和ν_2W_2为固定,所以组合后仍为SU_m和SU_n的IR基,因此

$$\left|\begin{matrix}[\nu],\ \beta[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m,\qquad W_1\ \ W_2\end{matrix}\right\rangle\ 属于\ \begin{matrix}SU_{mn}\supset\\ [\nu]\end{matrix}\ \begin{matrix}SU_m\\ [\nu_1]W_1\end{matrix}\ \times\ \begin{matrix}SU_n\\ [\nu_2]W_2\end{matrix}\ 和\ \begin{matrix}S_f(q)\\ [\nu]m\end{matrix}\ 表示.$$

由此得出一个重要结论:

置换群CG系数是将SU_m和SU_n的IR基耦合成$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ IR基的耦合系数.

因此利用置换群CG系数可以方便地构造任意m和n的$SU_m\supset SU_m\times SU_n$ IR基.

由(4-124)式和(7-106a)式可得到$S_f(q)$群反对称表示的$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ IR基

$$\left|[1^f],\ \begin{matrix}[\nu_1]\ \ [\tilde{\nu}_1]\\ W_1\ \ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_1}\frac{\Lambda^{\nu_1}_{m_1}}{\sqrt{h_{\nu_1}}}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\tilde{\nu}_1]\\ \tilde{m}_1W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-108a}$$

利用CG系数的幺正性,(7-106a)式可逆展开:

$$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1,\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2,\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\nu\beta m}C^{\nu_\beta m}_{\nu_1m_1,\,\nu_2m_2}\left|\begin{matrix}[\nu],\ \beta[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m\qquad W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-108b}$$

基本粒子层子模型中,重子的$SU_6\supset SU_3\times SU_2$,$SU_8\supset SU_4\times SU_2$分类波函数均可用表4·13-1给出的置换群$CG$系数统一表示如下:

$$\left|[3],\ \begin{matrix}[21]\,[21]\\ W_1\ \ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sqrt{1/2}\left[\left|\begin{matrix}[21]\\ W_1\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}[21]\\ W_2\end{matrix}\right\rangle_1+\left|\begin{matrix}[21]\\ W_1\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}[21]\\ W_2\end{matrix}\right\rangle_2\right],$$

$$\left|[3],\ \begin{matrix}[3]\,[3]\\ W_1\,W_2\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[3]\\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[3]\\ W_2\end{matrix}\right\rangle,$$

$$\left|[21],\begin{matrix}[3]&[21]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle_m=\left|\begin{matrix}[3]\\W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_m,\quad\left|[21],\begin{matrix}[21]&[3]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle_m=\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_m\left|\begin{matrix}[3]\\W_2\end{matrix}\right\rangle,$$

$$\left|[21],\begin{matrix}[21]&[21]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle_1=\sqrt{1/2}\left[\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_1-\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_2\right],$$

$$\left|[21],\begin{matrix}[21]&[21]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle_2=-\sqrt{1/2}\left[\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_2+\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_1\right],\tag{7-109}$$

$$\left|[21],\begin{matrix}[1^3]&[21]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle_m=\Lambda_m^{[21]}\left|\begin{matrix}[1^3]\\W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_{\tilde m}$$

$$\left|[1^3],\begin{matrix}[1^3]&[3]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[1^3]\\W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[3]\\W_2\end{matrix}\right\rangle,$$

$$\left|[1^3],\begin{matrix}[21]&[21]\\W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle=\sqrt{1/2}\left[\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_2-\left|\begin{matrix}[21]\\W_1\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}[21]\\W_2\end{matrix}\right\rangle_1\right].$$

这里$m=1$, 2分别代表杨盘 $\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}$ 和 $\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}$，$\tilde m$ 代表杨盘m的转置.

例：求味空间和自旋空间中层子模型 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 波函数

取同位旋表象，$i=u,\ d,\ s$; $\alpha=\alpha$(自旋朝上)，β(自旋朝下)，若我们要求 SU_6 群 56 维表示(即 $[\nu]=[3]$)，自旋为1/2，投影为 $-1/2$ 的质子波函数．由表 7·5–2 知道，质子对应的 Weyl 盘为 $\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}$；自旋为1/2、投影为 $-1/2$ 对应于 SU_2 Weyl 盘 $\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}$，令(7–109)式的第一个式子中 $W_1=\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}$，$W_2=\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}$，就得到所要的波函数

$$\begin{aligned}|[3],P_{1/2-1/2}\rangle&=\left|[3],\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}\ \begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle\\&=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_1\left|\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_1+\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_2\left|\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha&\beta\\\hline \beta\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_2\right).\end{aligned}\tag{7-110a}$$

由表 7·5–4 和表 7·5–5 可将上式展开为单粒子乘积态的线性组合

$$\begin{aligned}|[3],P_{1/2-1/2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}\Big[&\frac{1}{6}(2|uud\rangle-|udu\rangle-|duu\rangle)(|\alpha\beta\beta\rangle+|\beta\alpha\beta\rangle-2|\beta\beta\alpha\rangle)\\&+\frac{1}{2}(|udu\rangle-|duu\rangle)(|\alpha\beta\beta\rangle-|\beta\alpha\beta\rangle)\Big].\end{aligned}\tag{7-110b}$$

又如

$$|[3],\Delta^+_{3/2,1/2}\rangle=\left|[3],\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline u&u&d\\\hline\end{array}\ \begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline\end{array}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline u&u&d\\\hline\end{array}\right\rangle\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\alpha&\beta\\\hline\end{array}\right\rangle.\tag{7-110c}$$

类似地，由(7–109)第四式可得到 SU_6 群 70 维表示(即$[\nu]=[21]$)质子激发态，自旋为 3/2，投影为 $-1/2$ 的波函数

$$\left|\begin{matrix}[21]\\m,\ P_{3/2\,-1/2}\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline d\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_m\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\beta\\\hline\end{array}\right\rangle.\tag{7-111a}$$

如果令(7–109)式中 W_1 盘为 $\begin{array}{|c|c|}\hline u&u\\\hline c\\\cline{1-1}\end{array}$，$\begin{array}{|c|c|}\hline u&s\\\hline c\\\cline{1-1}\end{array}$ …等，就可得到 $SU_8\supset SU_4\times SU_2$ 波函数，例如

$$\left|[3],\ S^{+}_{1/2,1/2}\right\rangle=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_1\left|\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \alpha \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_1+\left|\begin{array}{|c|c|}\hline u & s \\ \hline c \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_2\left|\begin{array}{|c|c|}\hline \alpha & \alpha \\ \hline \beta \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle_2\right). \qquad (7\text{-}111\text{b})$$

由此看到，用(7-109)式可以非常方便地给出层子模型中三层子系统的任一 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基(m, n 为任意值).

以上给出的仅仅是质子在味空间和自旋空间的波函数．构成质子的三个夸克处于空间全对称态 $\psi^{[3]}(x)$ (这是由于处于基态的 3-夸克系统，任意两个夸克间的相对运动必处于 s 态($l=0$))．如果夸克没有其它自由度了，则质子的总波函数将为 $\psi^{[3]}(x)\times|[3],\ P_{1/2s_z}\rangle$. 根据置换群内积约化规则 $[3]\times[3]=[3]$，因此总波函数将是一个全对称波函数．但是根据夸克模型假设，夸克自旋为 1/2，必须满足费米统计．即 3-夸克系统的总波函应当是全反对称波函数．为了克服上述统计性上的矛盾，人们对夸克引进了新的自由度，即认为夸克除了味外，还有三种色，红，绿，蓝，记为 r, g, b, 并假定我们所能观察到的强子都是无色的，就可避免上述矛盾．r, g, b 三种夸克荷载色空间的 SU_3 群的基本表示．所谓无色态指的是 SU_3 色单态 $|[0]\rangle^{(c)}$. 对于 3-夸克系统，色单态就是

$$|[0]\rangle^{(c)}=|[1^3]\rangle^{(c)}=\left|\begin{array}{|c|}\hline r \\ \hline g \\ \hline b \\ \hline\end{array}\right\rangle. \qquad (7\text{-}112\text{a})$$

因此自旋投影为 s_z 的质子的全反对称波函数可表为

$$|P_{1/2s_z}\rangle=\psi^{[3]}(x)\,|[1^3]\rangle^{(c)}\,|[3],\ P_{1/2s_z}\rangle. \qquad (7\text{-}112\text{b})$$

而 Δ 粒子(核子共振态)的全反对称波函数为

$$|\Delta_{3/2s_z}\rangle=\psi^{[3]}(x)\,|[1^3]\rangle^{(c)}\,|[3],\ \Delta_{3/2s_z}\rangle. \qquad (7\text{-}112\text{c})$$

2. SU_{mn} 群 $IR[\nu]$ 中所包含的 $SU_m\times SU_n$ 群的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$

由 (7-106b) 可知，SU_m 群 $IR[\nu_1]$ 和 SU_n 群 $IR[\nu_2]$ 的乘积能约化到 SU_{mn} 群的那些 $IR[\nu]$，由置换群 CG 序列

$$[\nu_1]\times[\nu_2]=\sum_{\nu}(\nu_1\nu_2\nu)[\nu] \qquad (7\text{-}113)$$

决定，只需在杨图 $[\nu]$ 上删掉长度为 mn 的整列(为了满足(7-71)式).

(7-106a)式告诉我们，$SU_{mn}\,IR[\nu]$ 中包含其子群 SU_m 和 SU_n 的那些 $IR([\nu_1],[\nu_2])$ 也由置换群 CG 序列决定，唯一的限制是要略去行数大于 $m(n)$ 的杨图 $[\nu_1]([\nu_2])$，且在杨图 $[\nu_1]([\nu_2])$ 上划去长度为 $m(n)$ 的整列.

例如由 S_3 群 CG 序列(表 4.10) 和 (4-90) 式可得到 SU_6 群 $IR\,[3]$ 和 $[21]$ 中所包含的 SU_3, SU_2 的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$ 为

$$\begin{aligned}&[3]\to([3],[3])+([21],[21])=([3],[3])+([21],[1]).\\ &\text{维数 }56=\qquad\qquad\qquad\qquad(10,\ 4)+(8,\ 2).\end{aligned} \qquad (7\text{-}114\text{a})$$

$$\begin{aligned}&[21]\to([3],[21])+([21],[3])+([21],[21])+([1^3],[21])\\ &\quad=([3],[1])+([21],[3])+([21],[1])+([1^3],[1]).\\ &\text{维数 }70=(10,\ 2)+(8,\ 4)+(8,\ 2)+(1,\ 2).\end{aligned} \qquad (7\text{-}114\text{b})$$

基本粒子理论中，常用维数表示 SU_{mn}、SU_m 和 SU_n 群的 IR，所以上面式子中也标出了对应的维数．做上述约化时，左右两边的维数必须相等，这可以作为约化是否正确的一个检验.

3. $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基到 SU_{mn} Gelfand 基的表象变换

(7-106a) 式把 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ IR 基表示成 x 和 ξ 空间波函数的乘积的形式. 由于 SU_{mn} 的 Gelfand 基和 $S_f(q)$ 的标准基 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ W\end{matrix}\right\rangle$ 构成完备系, 因此也可把 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ IR 基用 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ W\end{matrix}\right\rangle$ 表示出来, 即

$$\left|\begin{matrix}[\nu],\ \beta[\nu_1][\nu_2]\\ m\qquad W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_W\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ W\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu],\ \beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-115}$$

表象变换系数显然和 m 无关, 因此上式中 m 可省去, 于是

$$\left|[\nu],\ \begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_W\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-116a}$$

表象变换系数满足幺正性:

$$\sum_W\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta'[\nu_1'][\nu_2']\\ W_1'\ W_2'\end{matrix}\right\rangle=\delta_{\beta\beta'}\delta_{\nu_1\nu_1'}\delta_{\nu_2\nu_2'}\delta_{W_1W_1'}\delta_{W_2W_2'},$$

$$\sum_{\beta\nu_1\nu_2W_1W_2}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W'\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\delta_{WW'}. \tag{7-116b}$$

因此(7-116a)式可反展开:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\nu_1\nu_2\beta\\ W_1W_2}}\left|[\nu],\ \begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\ \left.\begin{matrix}\beta[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-116c}$$

这种表象变换系数可用 Racah 的递降算符办法求, 详见文献[7], 那里给出了基本粒子中常用的 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 和 $SU_8\supset SU_4\times SU_2$ 的各种对称性的重子波函数的表象变换系数.

习　　题

1. 求出 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 波函数 $|[3],\ \Sigma^0_{1/21/2}\rangle$.
2. 求出 SU_6 群 $IR[31]$ 中所包含的 $SU_3\times SU_2$ 的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$.

§7.10　$SU_{n_1n_2n_3}\supset SU_{n_1}\times SU_{n_2}\times SU_{n_3}$ 分类基和置换群拉卡系数[1)]

若一个粒子有三种自由度 $x_i(i=1,\ 2,\ 3)$, V_{x_i} 空间中有 n_i 个单粒子态. 我们可以有两种方法来得到 $SU_n\supset SU_{n_1}\times SU_{n_2}\times SU_{n_3}$ 分类基($n=n_1n_2n_3$):

(1) $SU_n\supset(SU_{n_1n_2}\supset SU_{n_1}\times SU_{n_2})\times SU_{n_3}$ 分类基

由(7-106a)式, 这种分类基可表为

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_3]\\ [\nu_1]W_1[\nu_2]W_2, & W_3\end{matrix}\right)\right\rangle^{\beta_{12}\beta}$$

$$=\sum_{m_1m_2m_3m_{12}}C^{[\nu_{12}]\beta_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu]\beta,m}_{[\nu_{12}]m_{12},[\nu_3]m_3}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1W_1\end{matrix}\right\rangle^{x_1}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2W_2\end{matrix}\right\rangle^{x_2}\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3W_3\end{matrix}\right\rangle^{x_3}, \tag{7-117}$$

1) 读者最好先学习 SU_2 群的拉卡系数, 如可参看文献[18].

它是 $S_f(q)$ 群 IR 基 $[\nu]m$, $q=(x_1, x_2, x_3)$, 属于 SU_n 和 $SU_{n_1n_2}$ 群的 $IR[\nu]$ 和 $[\nu_{12}]$, 同时为 SU_{n_i} 群的 IR 基 $[\nu_i]W_i$.

(2) $SU_n\supset SU_{n_1}\times(SU_{n_2n_3}\supset SU_{n_2}\times SU_{n_3})$ 分类基

类似地可得到这种分类基的表达式

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_1] & [\nu_{23}]\\ W_1, & [\nu_2]W_2[\nu_3]W_3\end{pmatrix}\right\rangle^{\beta_{23}\beta'}$$

$$=\sum_{m_1m_2m_3m_{23}} C^{[\nu]\beta',m}_{\nu_1m_1,\nu_{23}m_{23}} C^{[\nu_{23}]\beta_{23},m_{23}}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1W_1\end{matrix}\right\rangle^{x_1}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2W_2\end{matrix}\right\rangle^{x_2}\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3W_3\end{matrix}\right\rangle^{x_3}, \qquad (7\text{-}118)$$

它是 $S_f(q)$ 群 IR 基 $[\nu]m$, 属于 SU_n 和 $SU_{n_2n_3}$ 群的 $IR[\nu]$ 和 $[\nu_{23}]$, 同时为 SU_{n_i} 群的 IR 基 $[\nu_i]W_i$.

例如 x_1 为 l 轨道空间, $n_1=2l+1$. x_2, x_3 为自旋同位旋空间, $n_2=n_3=2$. 利用(7-118)式和(4-124)式可构造出一个全反对称态:

$$\left|[1^f], \begin{pmatrix}[\nu_1] & [\nu_{23}]\\ W_1, & \beta[\nu_2]W_2[\nu_3]W_3\end{pmatrix}\right\rangle=\left|[1^f], \begin{matrix}[\nu_1] & [\tilde{\nu}_1]\\ \alpha LM, & \beta SM_STM_T\end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{m_1m_2m_3}\frac{\Lambda^{\nu_1}_{\tilde{m}_1}}{\sqrt{h_{\nu_1}(S_f)}} C^{[\tilde{\nu}_1]\beta,\tilde{m}_1}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\alpha LM\end{matrix}\right\rangle^{x_1}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2, M_S\end{matrix}\right\rangle^{x_2}\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3, M_T\end{matrix}\right\rangle^{x_3} \qquad (7\text{-}119)$$

式中 $\beta=\beta_{23}$, $[\nu_2]=\left[\frac{f}{2}+S, \frac{f}{2}-S\right]$, $[\nu_3]=\left[\frac{f}{2}+T, \frac{f}{2}-T\right]$[见(7-54b)式].

最近 DeGrand 和 Jaffe 在基本粒子口袋模型的研究中, 采用一种 $SU_{12}\supset(SU_3)_{味}\times(SU_2)_{自旋}\times(SU_2)_{赝自旋}$ 分类基. 例如若 SU_{12} 群的 $IR[\nu]=[3]$ (对应于色空间对称性 $[1^3]$), 而味空间 (u, d, s)、自旋空间 (α, β) 和赝自旋空间 (a, b) 的对称性都等于 $[21]$, 即 $[\nu_1]=[\nu_2]=[\nu_3]=[21]$, 这时附加量子数 β, $[\nu_{12}]$, β_{12} 都是多余的. 由(7-117)式及表 4·13-1 可得到该波函数为:

$$\left|[\nu];\begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_2] & [\nu_3]\\ W_1, & W_2, & W_3\end{matrix}\right\rangle=\left|[3]; \begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\;\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\;\begin{matrix}a & a\\ b\end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{m_1m_2m} C^{[21]m}_{[21]m_1,[21]m_2}\left|\begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\right\rangle_{m_1}\left|\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\right\rangle_{m_2}\left|\begin{matrix}a & a\\ b\end{matrix}\right\rangle_{m}$$

$$=\frac{1}{2}\left[\left(\left|\begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\right\rangle_1-\left|\begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\right\rangle_2\right)\left|\begin{matrix}a & a\\ b\end{matrix}\right\rangle_1\right]$$

$$-\frac{1}{2}\left[\left(\left|\begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\right\rangle_1\left|\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\right\rangle_2+\left|\begin{matrix}u & d\\ s\end{matrix}\right\rangle_2\left|\begin{matrix}\alpha & \alpha\\ \beta\end{matrix}\right\rangle_1\right)\left|\begin{matrix}a & a\\ b\end{matrix}\right\rangle_2\right], \qquad (7\text{-}120)$$

与 De Grand 和 Jaffe 文章上(p. 448)结果一致.

分类基(7-117)式和(7-118)式之间相差一个幺正变换

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{12}] & [\nu_3]\\ [\nu_1]W_1[\nu_2]W_2, & W_3\end{pmatrix}\right\rangle^{\beta_{12}\beta}$$

$$=\sum_{\nu_{23}\beta_{23}\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3, \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_1] & [\nu_{23}]\\ W_1 & [\nu_2]W_2[\nu_3]W_3\end{pmatrix}\right\rangle^{\beta_{23}\beta'}, \qquad (7\text{-}121)$$

式中 U 为置换群拉卡系数. 由(7-117)式和(7-118)式得

$$U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}=\sum_{固定m} C^{[\nu_{12}]\beta_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2} C^{[\nu]\beta,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_3m_3} C^{[\nu_{23}]\beta_{23},m_{23}}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3} C^{[\nu]\beta'm}_{\nu_1m_1,\nu_{23}m_{23}} \qquad (7\text{-}122)$$

其值和 m, $W_1W_2W_3$ 无关,因此如果我们不去注意酉群,而只着眼于置换群的话,(7-121)式可写成大家在角动量理论中所熟悉的公式

$$
\begin{aligned}
&|([\nu_1][\nu_2])[\nu_{12}],[\nu_3]:[\nu]m\rangle^{\beta_{12}\beta} \\
&=\sum_{\nu_{23}\beta_{23}\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}|[\nu_1]([\nu_2][\nu_3])[\nu_{23}]:[\nu]m\rangle^{\beta_{23}\beta'}.
\end{aligned}
\tag{7-123}
$$

唯一的差别在于置换群不是简单可约群,因此出现多重性指标 $\beta_{12}\beta_{23}\beta\beta'$. 拉卡系数满足幺正性.

$$
\sum_{\nu_{23}\beta_{23}\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \bar{\nu}_{12}\nu_{23})^{\bar{\beta}_{12}\bar{\beta}}_{\beta_{23}\beta'}=\delta_{\beta_{12}\bar{\beta}_{12}}\delta_{\beta\bar{\beta}}\delta_{\nu_{12}\bar{\nu}_{12}}, \tag{7-124a}
$$

$$
\sum_{\nu_{12}\beta_{12}\beta} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\bar{\nu}_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\bar{\beta}_{23}\bar{\beta}'}=\delta_{\beta_{23}\bar{\beta}_{23}}\delta_{\beta'\bar{\beta}'}\delta_{\nu_{23}\bar{\nu}_{23}}. \tag{7-124b}
$$

SU_2 群拉卡代数中的一些公式都可推广到置换群拉卡系数中来. 例如

$$
C^{[\nu_{12}]\beta_{12}m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu]\beta,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_3m_3}=\sum_{\beta_{23}\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}C^{[\nu_{23}]\beta_{23},m_{23}}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3}C^{[\nu]\beta',m}_{\nu_1m_1,\nu_{23}m_{23}}, \tag{7-125}
$$

$$
\sum_{\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}C^{[\nu]\beta',m}_{\nu_1m_1,\nu_{23}m_{23}}=\sum_{m_2m_3m_{12}} C^{[\nu_{12}]\beta_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu]\beta,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_3m_3}C^{[\nu_{23}]\beta_{23},m_{23}}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3}. \tag{7-126}
$$

文献[13]中关于 SU_2 群拉卡代数的推广公式也可进一步推广到置换群中来,令

$$
\{CCCC\}\equiv C^{[\nu_{12}]\beta_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}C^{[\nu]\beta,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_3m_3}C^{[\nu]\beta'm}_{\nu_1m_1,\nu_{23}m_{23}}C^{[\nu_{23}]\beta_{23},m_{23}}_{\nu_2m_2,\nu_3m_3}, \tag{7-127}
$$

则文献[13]中(13)式和(14)式可推广为

$$
\sum_{\text{固定}\ m_\varkappa} \{CCCC\}=\frac{h_\nu}{h_{\nu_\varkappa}}U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}. \tag{7-128a}
$$

$$
\sum_{\substack{\text{除}\ m_a m_b m_\varkappa\\ \text{外所有的}\ m}} \{CCCC\}\{C^{[\nu_\varkappa]\beta_\varkappa,m_\varkappa}_{\nu_am_a,\nu_bm_b}\}^{-1}=\frac{h_\nu}{h_{\nu_\varkappa}}\sum_{\beta_\varkappa} C^{[\nu_\varkappa]\beta_\varkappa,m_\varkappa}_{\nu_am_a,\nu_bm_b}U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'} \tag{7-128b}
$$

(7-128)式中的 $\nu_\varkappa m_\varkappa$ 可以是 ν_1m_1, ν_2m_2, ν_3m_3, $\nu_{12}m_{12}$, $\nu_{23}m_{23}$, νm 中任意一个. h_ν, $h_{\nu_\varkappa}$ 为置换群 $IR[\nu]$ 和 $[\nu_\varkappa]$ 的维数, (7-128b)式中 $C^{[\nu_\varkappa]\beta_\varkappa,m_\varkappa}_{\nu_am_a,\nu_bm_b}$ 为(7-127)式中四个 C 中的任意一个.

利用(4-189a)式可将置换群 S_f 的拉卡系数表成 S_{f-1} 群的拉卡系数和 $S_f\supset S_{f-1}$ ISF 乘积的线性组合

$$
\begin{aligned}
U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}=&\sum_{\substack{\nu_1'\nu_2'\nu_3'\nu_{12}'\nu_{23}'\\ \theta_{12}\theta_{23}\theta\theta'}} U(\nu_1'\nu_2'\nu'\nu_3';\ \nu_{12}'\nu_{23}')^{\theta_{12}\theta}_{\theta_{23}\theta'}\\
&\times C^{\nu_{12}\beta_{12},\nu_{12}'\theta_{12}}_{\nu_1\nu_1',\nu_2\nu_2'}C^{\nu\beta,\nu'\theta}_{\nu_{12}\nu_{12}',\nu_3\nu_3'}C^{\nu_{23}\beta_{23},\nu_{23}'\theta_{23}}_{\nu_2\nu_2',\nu_3\nu_3'}C^{\nu\beta',\nu'\theta'}_{\nu_1\nu_1',\nu_{23}\nu_{23}'},
\end{aligned}
\tag{7-129}
$$

式中 ν', ν_i' 代表 S_{f-1} 群的 IR, 上式求和时 ν' 为固定.

(7-126)式可写成

$$
\begin{aligned}
\sum_{\beta'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\beta_{12}\beta}_{\beta_{23}\beta'}C^{\nu\beta',\nu'\theta'}_{\nu_1\nu_1',\nu_{23}\nu_{23}'}=&\sum_{\substack{\nu_2'\nu_3'\nu_{12}'\\ \theta_{12}\theta_{23}\theta}} U(\nu_1'\nu_2'\nu'\nu_3';\ \nu_{12}'\nu_{23}')^{\theta_{12}\theta}_{\theta_{23}\theta'}\\
&\times C^{\nu_{12}\beta_{12},\nu_{12}'\theta_{12}}_{\nu_1\nu_1',\nu_2\nu_2'}C^{\nu\beta,\nu'\theta}_{\nu_{12}\nu_{12}',\nu_3\nu_3'}C^{\nu_{23}\beta_{23},\nu_{23}'\theta_{23}}_{\nu_2\nu_2',\nu_3\nu_3'}.
\end{aligned}
\tag{7-130}
$$

Vanagas (1972)对置换群的拉卡系数作过一些研究,对一些简单情形,给出了置换群拉卡系数的代数表达式.

§7.11 $SU_{n_1n_2n_3n_4}\supset SU_{n_1}\times SU_{n_2}\times SU_{n_3}\times SU_{n_4}$ 分类基和置换群 9ν 系数*

可以用以下两种方法得到这种分类基(令 $n=n_1n_2n_3n_4$)

(1) $SU_n\supset(SU_{n_1n_2}\supset SU_{n_1}\times SU_{n_2})\times(SU_{n_3n_4}\supset SU_{n_3}\times SU_{n_4})$ 分类基

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ m,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}] \\ [\nu_1]w_1[\nu_2]w_2, & [\nu_3]w_3[\nu_4]w_4\end{matrix}\right)\right\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau} = \sum_{\substack{m_1m_2m_3m_4 \\ m_{12}m_{34}}} C^{[\nu_{12}]\tau_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2} C^{[\nu_{34}]\tau_{34},m_{34}}_{\nu_3m_3,\nu_4m_4}$$

$$\cdot C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_{34}m_{34}} \left|\begin{matrix}[\nu_1] \\ m_1w_1\end{matrix}\right\rangle^{x_1} \left|\begin{matrix}[\nu_2] \\ m_2w_2\end{matrix}\right\rangle^{x_2} \left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ m_3w_3\end{matrix}\right\rangle^{x_3} \left|\begin{matrix}[\nu_4] \\ m_4w_4\end{matrix}\right\rangle^{x_4}. \tag{7-131}$$

(2) $SU_n \supset (SU_{n_1n_3} \supset SU_{n_1} \times SU_{n_3}) \times (SU_{n_2n_4} \supset SU_{n_2} \times SU_{n_4})$分类基

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ m,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}] \\ [\nu_1]w_1[\nu_3]w_3, & [\nu_2]w_2[\nu_4]w_4\end{matrix}\right)\right\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} = \sum_{\substack{m_1m_2m_3m_4 \\ m_{13}m_{24}}} C^{[\nu_{13}]\tau_{13}m_{13}}_{\nu_1m_1,\nu_3m_3} C^{[\nu_{24}]\tau_{24}m_{24}}_{\nu_2m_2,\nu_4m_4}$$

$$\cdot C^{[\nu]\tau'm}_{\nu_{13}m_{13},\nu_{24}m_{24}} \left|\begin{matrix}[\nu_1] \\ m_1w_1\end{matrix}\right\rangle^{x_1} \left|\begin{matrix}[\nu_2] \\ m_2w_2\end{matrix}\right\rangle^{x_2} \left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ m_3w_3\end{matrix}\right\rangle^{x_3} \left|\begin{matrix}[\nu_4] \\ m_4w_4\end{matrix}\right\rangle^{x_4}. \tag{7-132}$$

分类基(7-131)式和(7-132)之间差一个幺正变换

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ m,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}] \\ [\nu_1]w_1[\nu_2]w_2, & [\nu_3]w_3[\nu_4]w_4\end{matrix}\right)\right\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}$$

$$= \sum_{\substack{\nu_{13}\nu_{24} \\ \tau_{13}\tau_{24}\tau'}} \begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} \left|\begin{matrix}[\nu] \\ m,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}] \\ [\nu_1]w_1[\nu_3]w_3, & [\nu_2]w_2[\nu_4]w_4\end{matrix}\right)\right\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} \tag{7-133}$$

上式中幺正变换系数为置换群 9ν 系数，它可表为六个置换群 CG 系数积的线性组合

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} = \sum_{\text{固定}m} \{CCCCCC\}. \tag{7-134a}$$

$$\{CCCCCC\} = C^{[\nu_{12}]\tau_{12},m_{12}}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2} C^{[\nu_{34}]\tau_{34},m_{34}}_{\nu_3m_3,\nu_4m_4} C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_{12}m_{12},\nu_{34}m_{34}} C^{[\nu_{13}]\tau_{13},m_{13}}_{\nu_1m_1,\nu_3m_3} C^{[\nu_{24}]\tau_{24},m_{24}}_{\nu_2m_2,\nu_4m_4} C^{[\nu]\tau',m}_{\nu_{13}m_{13},\nu_{24}m_{24}}. \tag{7-134b}$$

文献[13]中的(9)、(10)两式可推广为

$$\sum_{\text{固定}\ m_k} \{CCCCCC\} = \frac{h_\nu}{h_{\nu_k}} \begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}. \tag{7-135a}$$

$$\sum_{\substack{\text{除}\ m_am_bm_k\text{外} \\ \text{对所有的}m}} \{CCCCCC\} \{C^{[\nu_k]\tau_k,m_k}_{\nu_am_a,\nu_bm_b}\}^{-1} = \frac{h\nu}{h_{\nu_k}} \sum_{\tau_k} C^{[\nu_k]\tau_k,m_k}_{\nu_am_a,\nu_bm_b} \begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}. \tag{7-135b}$$

类似于(7-130)式，S_f 群 9ν 系数可表为 S_{f-1} 群 9ν 系数和 $S_f \supset S_{f-1}$ ISF 的乘积的线性组合

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_3 \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau} = \sum_{\text{固定}\ \nu'} \begin{pmatrix}\nu'_1 & \nu'_2 & \nu'_{12} \\ \nu'_3 & \nu'_4 & \nu'_{34} \\ \nu'_{13} & \nu'_{24} & \nu'\end{pmatrix}^{\theta_{12}\theta_{34}\theta}_{\theta_{13}\theta_{24}\theta'} C^{\nu_{12}\tau_{12},\nu'_{12}\theta_{12}}_{\nu_1\nu'_1,\nu_2\nu'_2}$$

$$\cdot C^{\nu_{34}\tau_{34},\nu'_{34}\theta_{34}}_{\nu_3\nu'_3,\nu_4\nu'_4} C^{\nu\tau,\nu'\theta}_{\nu_{12}\nu'_{12},\nu_{34}\nu'_{34}} C^{\nu_{13}\tau_{13},\nu'_{13}\theta_{13}}_{\nu_1\nu'_1,\nu_3\nu'_3} C^{\nu_{24}\tau_{24},\nu'_{24}\theta_{24}}_{\nu_2\nu'_2,\nu_4\nu'_4} C^{\nu\tau',\nu'\theta'}_{\nu_{13}\nu'_{13},\nu_{24}\nu'_{24}}, \tag{7-136}$$

上式对 $\nu'_1\nu'_2\nu'_3\nu'_4\nu'_{12}\nu'_{34}\nu'_{13}\nu'_{24}\theta_{12}\theta_{34}\theta_{13}\theta_{24}\theta\theta'$ 求和.

容易看到

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ 0 & \nu_3 & \nu_3 \\ \nu_1 & \nu_{23} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} = U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'}. \tag{7-137}$$

9ν 系数的值和 $w_1w_2w_3w_4m$ 无关，当我们只注意置换群时，(7-133)式可写成

$$\left|(\nu_1\nu_2)\nu_{12}, (\nu_3\nu_4)\nu_{34};\ \nu m\right\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}$$

$$= \sum_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} \begin{pmatrix} \nu_1 & \nu_2 & \nu_{12} \\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34} \\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu \end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} \left|(\nu_1\nu_3)\nu_{13}, (\nu_2\nu_4)\nu_{24};\ \nu m\right\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'} \tag{7-138}$$

§7.12 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ 分类基

设有两组单粒子态，各有 m 和 n 个态，有 f_1 个粒子处在前 m 个态上，有 f_2 个粒子处在后 n 个态上. 例如原子物理或核物理中的混合组态 $(l_1)^{f_1}(l_2)^{f_2}$，l_1 轨道上有 f_1 个粒子，l_2 轨道上有 f_2 个粒子，$m=2l_1+1$，$n=2l_2+1$. 现在要求在 SU_{m+n}、SU_m 和 SU_n 群变换下都具有确定对称性的 f_1+f_2 个粒子系统的波函数. 这种波函数称为 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ 分类基.

1. 置换群 ORC 和 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ 分类基

设有三种单粒子乘积态：

$$\varphi^{(1)} = \varphi_{i_1}(1)\cdots\varphi_{i_{f_1}}(f_1), \quad i=1, 2, \cdots, m. \tag{7-139a}$$

$$\varphi^{(2)} = \varphi_{j_1}(f_1+1)\cdots\varphi_{j_{f_2}}(f), \quad j=m+1, \cdots, m+n, \quad f=f_1+f_2. \tag{7-139b}$$

$$\varphi = \varphi_{k_1}(1)\cdots\varphi_{k_f}(f), \quad k=1, 2, \cdots, m+n. \tag{7-139c}$$

$\begin{pmatrix}\varphi^{(1)}\\ \varphi^{(2)}\\ \varphi\end{pmatrix}$荷载置换群[1]$\begin{pmatrix}S_{f_1}\\ S_{f_2}\\ S_f\end{pmatrix}$和酉群$\begin{pmatrix}SU_m\\ SU_n\\ SU_{m+n}\end{pmatrix}$的可约基.

SU_m、SU_n、SU_{m+n} 和 $SU_m \otimes SU_n$ 群元分别具有以下形式

$$\underset{SU_m}{\left(\begin{array}{c|c} U_1 & 0 \\ \hline 0 & I \end{array}\right)\begin{matrix}\}m\\ \}n\end{matrix}}, \quad \underset{SU_n}{\left(\begin{array}{c|c} I & 0 \\ \hline 0 & U_2 \end{array}\right)}, \quad \underset{SU_{m+n}}{\begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1,m+n} \\ \vdots & & \vdots \\ u_{m+n,1} & \cdots & u_{m+n,m+n} \end{pmatrix}}, \quad \underset{SU_m \otimes SU_n}{\left(\begin{array}{c|c} U_1 & 0 \\ \hline 0 & U_2 \end{array}\right)} \tag{7-140}$$

它们的阶数分别为 $r_m = m^2-1$，$r_n = n^2-1$，$r=(m+n)^2-1$，$r' = r_m + r_n = m^2+n^2-2$. 显然 $SU_m \otimes SU_n$ 为 SU_{m+n} 的子群.

$\begin{pmatrix}\varphi^{(1)}\\ \varphi^{(2)}\end{pmatrix}$可以组合成$\begin{pmatrix}S_{f_1}\\ S_{f_2}\end{pmatrix}$的标准基$\begin{pmatrix}(\nu_1 m_1)\\ (\nu_2 m_2)\end{pmatrix}$和$\begin{pmatrix}SU_m\\ SU_n\end{pmatrix}$群的标准基$\begin{pmatrix}(\nu_1 w_1)\\ (\nu_2 w_2)\end{pmatrix}$. w_1，w_2 盘中分别填以态指标 $i_1, \cdots, i_{f_1}$ 和 $j_1, \cdots, j_{f_2}$. 利用置换群外积约化系数可以将这两套基 $\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0,\ w_1\end{matrix}\right\rangle = \psi^{[\nu_1]}_{m_1}(\omega_1^0, w_1)$ 和 $\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0,\ w_2\end{matrix}\right\rangle = \psi^{[\nu_2]}_{m_2}(\omega_2^0, w_2)$ 耦合成 S_f 群的标准基 (ν, m)：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta[\nu_1]w_1[\nu_2]w_2\end{matrix}\right\rangle \equiv \left|\begin{matrix}[\nu],\ \beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ m \qquad w_1 \quad w_2\end{matrix}\right\rangle$$

$$= \sum_{\substack{m_1\omega_1\\ m_2\omega_2}} C^{[\nu]\beta m}_{\nu_1 m_1\omega_1, \nu_2 m_2\omega_2}\begin{pmatrix}\omega_0\\ \omega\end{pmatrix}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0,\ w_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0,\ w_2\end{matrix}\right\rangle\right]$$

$$= \sum_{\substack{m_1\omega_1\\ m_2\omega_2}} C^{[\nu]\beta, m}_{\nu_1 m_1\omega_1, \nu_2 m_2\omega_2}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1,\ w_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2,\ w_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-141}$$

---

1) 以下一律用 S_{f_2} 代表置换群 $S'_{f_2} = S_{f_2}(f_1+1, \cdots, f_1+f_2)$.

根据类似于对(7-106a)式的讨论，可以证明上式是 SU_{m+n} 群 $[\nu]_\beta$ 表示的不可约基，同时它又是 $SU_m(SU_n)$ 群的不可约基 $\nu_1W_1(\nu_2W_2)$. 由此得出另一个重要结论：

置换群外积约化系数同时又是将 SU_m 和 SU_n IR 基耦合成 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基的耦合系数.

因此，利用 ORC 可以方便地构造任意 m 和 n 的 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基.

根据 ORC 的幺正性，可将(7-141)式逆展开：

$$\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1,\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2,\ W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\nu\beta m}C^{[\nu]\beta m}_{\nu_1m_1\omega_1,\nu_2m_2\omega_2}\left|\begin{matrix}[\nu],&\beta[\nu_1]&[\nu_2]\\ m&W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-142}$$

2. SU_{m+n} 群 $IR[\nu]$ 中所包含的 $SU_m\otimes SU_n$ 群 $IR([\nu_1],[\nu_2])$

上式表明，SU_m 群 $IR[\nu_1]$ 和 SU_n 群 $IR[\nu_2]$ 的乘积能约化到 SU_{m+n} 群的那些 $IR[\nu]$ 由置换群外积约化规则(即 Littlewood 规则)决定，但需在杨图 $[\nu]$ 上删去长度为 $m+n$ 的整列.

(7-141)式表明 SU_{m+n} $IR[\nu]$ 中包含其子群 SU_m 和 SU_n 的那些 $IR([\nu_1],[\nu_2])$，也由置换群外积约化规则决定，即 SU_{m+n} $IR[\nu]$ 中包含 SU_m 和 SU_n 的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$ 的次数等于 S_{f_1} 群 $IR[\nu_1]$ 和 S_{f_2} 群 $IR[\nu_2]$ 的外积中，$S_{f_1+f_2}$ 群 $IR[\nu]$ 出现的次数 $\{\nu_1\nu_2\nu\}$，当然仍要去掉行数大于 $m(n)$ 的杨图 $[\nu_1]([\nu_2])$，在杨图 $[\nu_1]([\nu_2])$ 上划去长度为 $m(n)$ 的整列.

例如由表 4.14-2 得到 SU_5 $IR[32]$ 中所包含的 $SU_3\otimes SU_2$ 的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$ 为：

$$\begin{aligned}[32]\to&([32],[0])+([0],[1])+([31],[1])+([1],[2])\\&+([22],[1])+([1],[0])+([3],[2])+([2],[3])\\&+([21],[2])+([2],[1])+([21],[0])+([11],[1]).\\ \text{维数 }175\to&(15,1)+(1,2)+(15,2)+(3,3)+(6,2)+(3,1)\\&+(10,3)+(6,4)+(8,3)+(6,2)+(8,1)+(3,2).\end{aligned} \tag{7-143}$$

3. $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基到 SU_{m+n} Gelfand 基的表象变换

$SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基(7-141)式也可表为 SU_{m+n} 群 Gelfand 基的线性组合：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta[\nu_1]W_1[\nu_2]W_2\end{matrix}\right\rangle=\left|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]&[\nu_2]\\ W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{W}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]&[\nu_2]\\ W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-144}$$

这里的表象变换系数 $\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right|[\nu],\begin{matrix}\tau[\nu_1]&[\nu_2]\\ W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle$ 仍满足幺正性(7-116)式，它和置换群表象变换系数 $\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|[\nu],\begin{matrix}\tau[\nu_1]&[\nu_2]\\ m_1&m_2\end{matrix}\right\rangle$ 有很密切的联系.

重复 § 7.7 第 1 小节从 (4-142 a) 式导出 (7-95) 式的推导过程，并利用 (7-94) 式，由 (4-168 a)式可导出

$$\begin{aligned}&\left|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]&[\nu_2]\\ W_1&W_2\end{matrix}\right\rangle R^{[\nu_1]m_1}(\overline{\omega}_1^0)R^{[\nu_2]m_2}(\overline{\omega}_2^0)\\&=\sum_{m}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle R^{[\nu]m}(\overline{\omega}^0)\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]&[\nu_2]\\ m_1&m_2\end{matrix}\right\rangle\end{aligned} \tag{7-145}$$

比较(7-144)式和(7-145)式，得到两种表象变换系数的关系为

$$
\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ W_1\;\;W_2\end{matrix}\right\rangle
$$

$$
=[R^{[\nu_1]m_1}(\overline{\omega}_1^0)R^{[\nu_2]m_2}(\overline{\omega}_2^0)]^{-1}\sum_m{}' R^{[\nu]m}(\overline{\omega}^0)\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ m_1\;\;m_2\end{matrix}\right\rangle, \quad (7\text{-}146a)
$$

式中$(\overline{\omega}^0)$, $(\overline{\omega}_1^0)$, $(\overline{\omega}_2^0)$分别为W, W_1, W_2盘中的正序态. W盘就是态空间杨盘$Y_m^{[\nu]}(\overline{\omega}^0)$, W_i盘就是态空间杨盘$Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\overline{\omega}_i^0)$, 上式中带撇累加号表示只对能给出同一$W$盘的那些$m$求和.

由(7-146a)式可知, 求得了置换群表象变换系数$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ m_1\;\;m_2\end{matrix}\right\rangle$就可求得任一$SU_{m+n}$群的表象变换系数$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ W_1\;\;W_2\end{matrix}\right\rangle$. 当$W$盘中所有态指标全不相同时, (7-146a)式求和号内只剩下一项. 所有比例系数R均为1, 于是有

$$
\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ W_1\;\;W_2\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ m_1\;\;m_2\end{matrix}\right\rangle, \text{当 } W \text{ 盘中态指标全不相同时.} \quad (7\text{-}146b)
$$

例如令表4.18-1a中表头杨盘内的指标1, 2, 3, 4分别为态指标$\alpha, \beta, \gamma, \delta$, 杨盘就成了Weyl盘. 表象变换系数$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ m_1\;\;m_2\end{matrix}\right\rangle$就变成了$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\beta[\nu_1]\,[\nu_2]\\ W_1\;\;W_2\end{matrix}\right\rangle$, 例如由该表可得到

$$
\left|[31],\boxed{\alpha}\;\begin{array}{|c|c|}\hline \beta&\gamma\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=\frac{\sqrt{8}}{3}\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\gamma\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle-\frac{1}{6}\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\beta&\delta\\ \hline \gamma\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle-\frac{1}{\sqrt{12}}\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline \alpha&\gamma&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle.
$$

根据类似于§7.7第一段关于由ORC计算SU_n群CG系数的步骤, 利用(7-146a)式, 可以从置换群表象变换系数表及比例系数表4.8导出酉群表象变换系数表. 例如在表4.18-1a中令$(\omega_0)=(\alpha\beta\beta\delta)$, 即$1\to\alpha$, $2\to\beta$, $3\to\beta$, $4\to\delta$. 这时表4.18-1a中的杨盘就变到了表7·11-1中的Weyl盘, 该表中第三行的W_2盘中的两个β处于同一列,

$$
\left|[31],\boxed{\alpha}\;\begin{array}{|c|c|}\hline \beta&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle=0.
$$

将表4.18-1a中第一、二行分别除以$R^{(3)}(\beta\beta\delta)=\sqrt{2}$和$R^{[21]1}(\beta\beta\delta)=\sqrt{2}$; 第一、二、三列分别乘以$R^{[31]1}(\alpha\beta\beta\delta)=\sqrt{2}$, $R^{[31]2}(\alpha\beta\beta\delta)=\frac{1}{\sqrt{2}}$, $R^{[31]3}(\alpha\beta\beta\delta)=\sqrt{\frac{3}{2}}$, 就得到表7·11-1. 再将表7·11-1中属于同一表头的第二、第三列相加, 就得到态指标有重复时的SU_{m+n}群表

表7.11-1 (中间步骤)

	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|}\hline \alpha&\beta&\beta\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|}\hline \alpha&\beta&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|}\hline \alpha&\beta&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}$
$[31],\boxed{\alpha}\;\boxed{\beta\,\beta\,\delta}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{\sqrt{2}}{6}$	$-\frac{\sqrt{2}}{2}$
$[31],\boxed{\alpha}\;\begin{array}{\|c\|c\|}\hline \beta&\beta\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}$	$\frac{\sqrt{8}}{3}$	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{4}$
$[31],\boxed{\alpha}\;\begin{array}{\|c\|c\|}\hline \beta&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}$	0	0	0

表7.11-2 $\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}[\nu_1][\nu_2]\\ W_1\;\;W_2\end{matrix}\right\rangle$

	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|}\hline \alpha&\beta&\beta\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}$	$\begin{array}{\|c\|c\|c\|}\hline \alpha&\beta&\delta\\ \hline \beta\\ \cline{1-1}\end{array}$
$[31],\boxed{\alpha}\;\boxed{\beta\,\beta\,\delta}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{\sqrt{8}}{3}$
$[31],\boxed{\alpha}\;\begin{array}{\|c\|c\|}\hline \beta&\beta\\ \hline \delta\\ \cline{1-1}\end{array}$	$\frac{\sqrt{8}}{3}$	$-\frac{1}{3}$

象变换系数表 7·11-2.

再令表 7·11-2 中的正序态$(\overline{\omega}_0)=(\alpha\beta\beta\delta)$等于其它一些值，就可得出任意 SU_{m+n} 群的表象变换系数，例如令

$$(\overline{\omega}_0)=(\alpha\beta\beta\delta)=(1223),(1224),(1225),(1334),(1335),$$
$$(1445),(2334),(2335),(2445),(3445)$$

就得到 SU_5 群的表象变换系数. 由此可见每一个表象变换系数实际上都对应于无穷多个同类型的表象变换系数.

习　题

1. 求出 SU_4 群[311]表示中所包含的 $SU_2\otimes SU_2$ 的 $IR([\nu_1],[\nu_2])$，并用约化前后维数相等检验.

§7.13　同位标量因子 (*ISF*) 和母分系数

1. 同位标量因子

(1) Gelfand 基

§3.16 关于群 G 的 CG 系数因式分解公式 (3-303) 式也适用于李群. Gelfand 基是 $SU_n\supset SU_{n-1}\otimes U_1\supset\cdots\supset SU_2\otimes U_1\supset SO_2$ 分类基. 因此它的 CG 系数可以分解成一串 $SU_i\supset SU_{i-1}\otimes U_1$ 的 ISF 之积(如果中间出现多重指标，还要对这些中间多重性指标求和)，$SU_i\supset SU_{i-1}\otimes U_1$ ISF 又称为 SU_{i-1} 单态因子，简写为$(SU_{i-1}SF)$ (Singlet Factor)，于是 Gelfand 表象下 SU_n 群 CG 系数可示意地表为

$$(SU_nCGC)=(SU_{n-1}SF)(SF_{n-2}SF)\cdots(SU_2SF)(SU_2CGC).\tag{7-147}$$

SU_2 群 CG 系数就是 SU_1SF. 因此计算 SU_n 群 CG 系数归结为计算一连串(SU_iSF). 由(3-303)式得到:

例 1　***SU_3 CG*** 系数可表为

$$\underbrace{C^{[\mu]\theta,IYI_z}_{[\mu_1]I_1Y_1I_{1z},[\mu_2]I_2Y_2I_{2z}}}_{SU_3CGC}=\underbrace{C^{[\mu]\theta,IY}_{[\mu_1]I_1Y_1,[\mu_2]I_2Y_2}}_{SU_2SF}\underbrace{C^{I,I_z}_{I_1I_{1z},I_2I_{2z}}}_{SU_2CGC}\tag{7-148}$$

例 2　***SU_4 CG*** 系数可表为

$$C^{[\nu]\tau,[\mu]zIYI_z}_{[\nu_1][\mu_1]z_1I_1Y_1I_{1z},[\nu_2][\mu_2]z_2I_2Y_2I_{2z}}=\sum_\theta\underbrace{C^{[\nu]\tau,[\mu]\theta z}_{[\nu_1][\mu_1]z_1,[\nu_2][\mu_2]z_2}}_{SU_3SF}\underbrace{C^{[\mu]\theta,IY}_{[\mu_1]I_1Y_1,[\mu_2]I_2Y_2}}_{SU_2SF}\underbrace{C^{I,I_z}_{I_1I_{1z},I_2I_{2z}}}_{SU_2CGC}\tag{7-149}$$

de Swart 和 Haacke 给出了 SU_2SF 和 SU_3SF 的部分系数表. §7.17 将给出 SU_n 群单态因子的计算方法.

(2) $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基

用记号

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta[\sigma]W_1[\mu]W_2\end{matrix}\right\rangle,\quad\begin{matrix}\beta=1,2,\cdots,(\nu_1\nu_2\nu)\text{对 }SU_{mn}\\ \beta=1,2,\cdots,\{\nu_1\nu_2\nu\}\text{对 }SU_{m+n}\end{matrix}\tag{7-150}$$

表示这样一种分类基，它属于 $SU_{mn}(SU_{m+n})$群的 $IR[\nu]$，且为 SU_m 和 SU_n 的 IR 基$[\sigma]W_1$ 和$[\mu]W_2$.

令(3-300)式中 $A=[\sigma][\mu]$，$m=W_1W_2$，就得到用 CG 系数将两个这种分类基组合成同一种分类基的公式:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\tau\\ \beta[\sigma]W_1[\mu]W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma][\mu]W_1W_2}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu'W_1'W_2',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''W_1''W_2''}$$

$$\cdot\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'[\sigma']W_1'[\mu']W_2'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''[\sigma'']W_1''[\mu'']W_2''\end{matrix}\right\rangle, \qquad (7\text{-}151)$$

式中对 $\beta'\sigma'\mu'W_1'W_2'\beta''\sigma''\mu''W_1''W_2''$ 求和. 类似地由 (3-303) 式作指标代换得 CG 系数的因式分解公式:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma][\mu]W_1W_2}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu'W_1'W_2',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''W_1''W_2''}=\sum_{\theta\varphi}C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}C^{[\sigma]\theta W_1}_{\sigma'W_1',\sigma''W_1''}C^{[\mu]\varphi W_2}_{\mu'W_2',\mu''W_2''}, \qquad (7\text{-}152)$$

$$\theta=1,\ 2,\ \cdots,\ \{\sigma'\sigma''\sigma\},\quad \varphi=1,\ 2,\ \cdots,\ \{\mu'\mu''\mu\}$$

上式等式右边第一个因子为 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF, 第二、第三个因子为 SU_m 和 SU_n 群 CG 系数, 上式可示意地表为

$$(SU_{mn}\supset SU_m\times SU_nCGC)=(SU_{mn}\supset SU_m\times SU_nISF)(SU_mCGC)(SU_nCG),$$

$$(SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_nCGC)=(SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_nISF)(SU_mCGC)(SU_nCGC). \qquad (7\text{-}153)$$

由 (3-305)、(3-306) 两式作指标代换即可得到 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF 的幺正性. 对固定$[\sigma]$、$[\mu]$有,

$$\sum_{\substack{\beta'\sigma'\mu'\theta\\ \beta''\sigma''\mu''\varphi}}C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}C^{[\bar\nu]\bar\tau,\bar\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}=\delta_{\nu\bar\nu}\delta_{\beta\bar\beta}\delta_{\tau\bar\tau}, \qquad (7\text{-}154a)$$

$$\sum_{\nu\beta\tau}C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\bar\theta[\mu]\bar\varphi}_{[\nu']\bar\beta'[\bar\sigma'][\bar\mu'],[\nu'']\bar\beta''[\bar\sigma''][\bar\mu'']}$$

$$=\delta_{\beta'\bar\beta'}\delta_{\beta''\bar\beta''}\delta_{\sigma'\bar\sigma'}\delta_{\sigma''\bar\sigma''}\delta_{\mu'\bar\mu'}\delta_{\mu''\bar\mu''}\delta_{\theta\bar\theta}\delta_{\varphi\bar\varphi}. \qquad (7\text{-}154b)$$

m, n 为任意值时 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF 和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF 的计算见 § 7.16 和 § 7.17.

例 1 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$

由于 SU_2 群为简单可约群, 因此附加指标 θ, φ 是多余的, SU_2 群的 IR 可用 S, T 标志, $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ CG 系数可分解为

$$C^{[\nu]\tau,\beta STM_SM_T}_{[\nu_1]\beta_1S_1T_1M_{S_1}M_{T_1},[\nu_2]\beta_2S_2T_2M_{S_2}M_{T_2}}=C^{[\nu]\tau,\beta ST}_{[\nu_1]\beta_1S_1T_1,[\nu_2]\beta_2S_2T_2}C^{SM_S}_{S_1M_{S_1},S_2M_{S_2}}C^{TM_T}_{T_1M_{T_1},T_2M_{T_2}} \qquad (7\text{-}155)$$

$$SU_4\supset SU_2\times SU_2ISF,\ SU_2CGC,\ SU_2CGC$$

例 2 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$

用$[\nu]$, $[\mu]$, S 分别标志 SU_6, SU_3 和 SU_2 的 IR, $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ CG 系数可表为:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\mu]IYSI_zS_z}_{[\nu_1]\beta_1[\mu_1]I_1Y_1S_1I_{1z}S_{1z},[\nu_2]\beta_2[\mu_2]I_2Y_2S_2I_{2z}S_{2z}}$$

$$=\sum_\theta C^{[\nu]\tau,\beta[\mu]\theta S}_{[\nu_1]\beta_1[\mu_1]S_1,[\nu_2]\beta_2[\mu_2]S_2}C^{[\mu]\theta,IYI_z}_{[\mu_1]I_1Y_1I_{1z},[\mu_2]I_2Y_2I_{2z}}C^{S,S_z}_{S_1S_{1z}S_2S_{2z}} \qquad (7\text{-}156)$$

$$SU_6\supset SU_3\times SU_2ISF\quad SU_3CGC\quad SU_2CGC$$

例 3 **SU_n** 群的其它分类基的 **CG** 系数也可同样进行因式分解. 例如 **$SU_{2l+1}\supset SO_3$** 分类基$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle$(附加量子数 α 用来区分 SU_{2l+1} $IR[\nu]$中 SO_3 $IR(L)$出现不止一次的情形):

$$C^{[\nu]\tau,\alpha LM}_{[\nu_1]\alpha_1L_1M_1,[\nu_2]\alpha_2L_2M_2}=C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2}C^{LM}_{L_1M_1,L_2M_2}$$

$$SU_{2l+1}\supset SO_3CGC,\ SU_{2l+1}\supset SO_3ISF,\ SO_3CGC \qquad (7\text{-}157)$$

(3-302)式、(3-307)式现在可写成(下式中方括号代表角动量耦合):

$$\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\alpha_1L_1\alpha_2L_2}C^{[\nu]_\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ \alpha_2L_2\end{matrix}\right\rangle\right]^L_M, \tag{7-158a}$$

$$\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ \alpha_2L_2\end{matrix}\right\rangle\right]^L_M=\sum_{\nu\tau\alpha}C^{[\nu]_\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2}\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-158b}$$

2. 轨道母分系数

(1) 单粒子母分系数

设 l 轨道上有 $n-1$ 个粒子，处于某一个态$\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1M_1\end{matrix}\right\rangle$，它是置换群 S_{n-1} 的标准基$[\nu_1]m_1$，也是 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ 分类基．我们的任务是对 l 轨道上 n 个粒子构造相似的态（即同一种分类基）$\left|\begin{matrix}l^n[\nu]\\ m,\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle$．因为$\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1M_1\end{matrix}\right\rangle\psi_{lm_l}(n)$ 构成 l^n 组态的一个完备集，$\left|\begin{matrix}l^n[\nu]\\ m,\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle$可用它来展开：

$$\left|\begin{matrix}l^n[\nu]\\ m,\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\alpha_1L_1}(l^{n-1}[\nu_1]\alpha_1L_1,\ l|\}l^n[\nu]\alpha L)\left[\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle\psi_l(n)\right]^L_M. \tag{7-159a}$$

$(l^{n-1}[\nu_1]\alpha_1L_1,l|\}l^n[\nu]\alpha L)$称为轨道单粒子母分系数，$\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle$称为母态 (parent state)．上式中杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 和 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$ 的关系为 $Y^{[\nu]}_m$ 中去掉方块 n 即得到 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$．

另一方面，根据(7-158a)式，我们可用 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ ISF 将$\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle$和 $\psi^{[1]}_{lm_l}$ 耦合成同一种分类基

$$\left|\begin{matrix}l^n[\nu]\\ m,\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\alpha_1L_1}C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}\left[\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle\psi^{[1]}_l(n)\right]^L_M. \tag{7-159b}$$

由于 ISF 和量子数 m_1 及 M 无关，上式可简写为

$$|[\nu]\alpha L\rangle=\sum_{\alpha_1L_1}C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}|[\nu_1]\alpha_1L_1\rangle\psi(n). \tag{7-159c}$$

这里省略了角动量耦合记号$[\quad]^L_M$，例子可见(7-191)式、(7-197)式．

由 ISF 定义可知 (7-159b) 左方一定属于 SU_{2l+1} 群 $IR[\nu]$，再根据§7.2 定理又知它也必定属于置换群 S_n 的 $IR[\nu]$，此外因为$[\nu]$，$[\nu_1]$，m_1 固定后，第 n 个方块在杨图$[\nu]$上的位置也唯一确定了，即 m 唯一确定了，故上式左方也是置换群 S_n 的 IR 基$[\nu]m$．比较(7-159a)式和(7-159b)式可知，$SU_{2l+1}\supset SO_3$ 的 ISF 就是轨道母分系数

$$(l^{n-1}[\nu_1]\alpha_1L_1,\ l|\}l^n[\nu]\alpha L)=C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}. \tag{7-160}$$

它满足幺正性

$$\sum_{\alpha_1L_1}C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}C^{[\nu'],\alpha' L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\alpha\alpha'}, \tag{7-161a}$$

$$\sum_{\nu\alpha}C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1'L_1',[1]l}=\delta_{\alpha_1\alpha_1'}\delta_{L_1L_1'}. \tag{7-161b}$$

(7-159b)式可以逆展开

$$\left[\left|\begin{matrix}l^{n-1}[\nu_1]\\ m_1,\ \alpha_1L_1\end{matrix}\right\rangle\psi_l(n)\right]^L_M=\sum_{\nu\alpha}C^{[\nu],\alpha l}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]l}\left|\begin{matrix}l^n[\nu]\\ m,\ \alpha LM\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-162}$$

在 SU_{2l+1} 群和 SO_3 群之间可以加进其它子群(如 SO_{2l+1} 群)或子群链．例如对 d 壳，通

常在 SU_5 和 SO_3 之间插入 SO_5 群. n 个粒子的 $SU_5\supset SO_5\supset SO_3$ 分类基可展开为$(n-1)$个粒子和第 n 个粒子的 IR 基之积

$$\left|\begin{matrix} d^n[\nu] \\ m,\ (\omega)LM \end{matrix}\right\rangle=\sum_{\omega_1 L_1} C^{[\nu],(\omega)L}_{[\nu_1](\omega_1)L_1,[1](\omega_2)d}\left[\left|\begin{matrix} d^{n-1}[\nu_1] \\ m_1,\ \omega_1 L_1 \end{matrix}\right\rangle\psi_d(n)\right]^L_M, \tag{7-163}$$

上式中(ω)为 SO_5 的 IR 的标志(注意勿与正序列的标志相混). 式中的母分系数或 $SU_5\supset SO_5\supset SO_3$ 的 ISF 可因式分解

$$C^{[\nu],(\omega)L}_{[\nu_1](\omega_1)L_1,[1](\omega_2)d}=C^{[\nu],(\omega)}_{[\nu_1](\omega_1),[1](\omega_2)}C^{(\omega),L}_{(\omega_1)L_1,(\omega_2)d} \tag{7-164}$$

$$SU_5\supset SO_5 ISF,\ SO_5\supset SO_3 ISF$$

进一步的讨论见 Jahn (1950) a, b; (1951).

关于母分系数的定义也可推广到混合组态, 例如 $2s$, $1d$ 壳. 取 $SU_6\supset SU_3\supset SO_3$ 分类(Elliott 1958), 用 $[\nu]$ 和 $(\lambda\mu)$(对应于配分 $[\lambda+\mu,\ \mu]$) 标志 SU_6 和 SU_3 的 IR. 类似于(7-163)式,有

$$\left|\begin{matrix} [\nu] \\ m,\ \beta(\lambda\mu)KLM \end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{\beta_1\lambda_1\mu_1K_1L_1L_2} C^{[\nu],\beta(\lambda\mu)}_{[\nu_1]\beta_1(\lambda_1\mu_1),[1](20)}C^{(\lambda\mu),KL}_{(\lambda_1\mu_1)K_1L_1,(20)L_2}\left[\left|\begin{matrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \beta_1(\lambda_1\mu_1)K_1L_1 \end{matrix}\right\rangle\psi_{L_2}(n)\right]^L_M, \tag{7-165}$$

式中 $L_2=0,\ 2$. 等式右方两个系数分别为 $SU_6\supset SU_3$ 和 $SU_3\supset SO_3$ ISF.

注意 s, d 壳中的单粒子态属于 SU_3 群的(20)(即配分为[2])表示.

(2) 多粒子母分系数

下面我们考虑从 n 个粒子中分出 n_2 个粒子的母分系数. 仍用(ω_1^0)代表$(1,\ 2,\ \cdots,\ n_1)$, (ω_2^0)代表$(n_1+1,\ \cdots,\ n)$, $n=n_1+n_2$, 仍以 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ 分类为例.

在前面讨论中我们大多采用 Yamanouchi 基. 在讨论多粒子母分系数时,却用 $S_n\supset S_{n_1}\times S_{n_2}$ 基更为方便. n 个粒子的 $S_n\supset S_{n_1}\times S_{n_2}$ 和 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ 分类基可用 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ ISF 展开:

$$\left|\begin{matrix} [\nu] \\ \tau\nu_1m_1\nu_2m_2,\ \alpha LM \end{matrix}\right\rangle=\sum_{\alpha_1L_1\alpha_2L_2} C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{\nu_1\alpha_1L_1,\nu_2\alpha_2L_2}\left[\left|\begin{matrix} l^{n_1}[\nu_1] \\ m_1\omega_1^0,\ \alpha_1L_1 \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} l^{n_2}[\nu_2] \\ m_2\omega_2^0,\ \alpha_2L_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^L_M. \tag{7-166}$$

这里右方第一个因子为 $SU_{2l+1}\supset SO_3$ ISF, 又称为轨道多粒子母分系数,常常记为

$$(l^{n_1}[\nu_1]\alpha_1L_1,\ l^{n_2}[\nu_2]\alpha_2L_2|\}l^n[\nu]\tau\alpha L)=C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{\nu_1\alpha_1L_1,\nu_2\alpha_2L_2}. \tag{7-167}$$

如果取 s_n 群的 Yamanouchi 基,则有

$$\left|\begin{matrix} l^n[\nu] \\ m,\ \alpha LM \end{matrix}\right\rangle\sum_{\substack{\nu_2m_1\tau \\ \alpha_1L_1\alpha_2L_2}}\left\langle\begin{matrix} [\nu] \\ m \end{matrix}\right|[\nu],\left.\begin{matrix} \tau\nu_1\nu_2 \\ m_1m_2 \end{matrix}\right\rangle C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{\nu_1\alpha_1L_1,\nu_2\alpha_2L_2}\left[\left|\begin{matrix} l^{n_1}[\nu_1] \\ m_1\omega_1^0,\ \alpha_1L_1 \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} l^{n_2}[\nu_2] \\ m_2\omega_2^0,\ \alpha_2L_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^L_M. \tag{7-168}$$

(s)分类基, (7-166)式和(7-168)式由(7-102b)式和(7-102c)式所代

总之,所谓母分系数其实就是某种 ISF 或某种 CG 系数. 例如 Harvey 文章表 4 中列的所谓双粒子轨道母分系数其实就是熟知的 SU_2 群 CG 系数. (见 Chen et al, 1983).

(3) 双粒子母分系数

物理上最常用的是单粒子和双粒子母分系数, 而后者又可用前者表示出来. 令杨盘 $Y^{[\nu]}_m$ 中移去方块 n 后得到的杨盘为 $Y^{[\nu']}_{m'}$, 从 $Y^{[\nu']}_{m'}$ 中移去方块$(n-1)$后得到的杨盘为 $Y^{[\nu_1]}_{m_1}$,

由(7-159b)式得

$$
\begin{aligned}
\left|\begin{matrix} l^n[\nu] \\ m,\ \alpha LM \end{matrix}\right\rangle &= \sum_{\alpha' L'} C^{[\nu],\alpha l}_{[\nu']\alpha' L',[1]l} \left[\left|\begin{matrix} l^{n-1}[\nu'] \\ m',\ \alpha' L' \end{matrix}\right\rangle \psi_l(n)\right]^L_M \\
&= \sum_{\alpha' L' \alpha_1 L_1} C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu']\alpha' L',[1]l} C^{[\nu'],\alpha' L'}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]l} \left[\left[\left|\begin{matrix} l^{n-2}[\nu_1] \\ m_1,\ \alpha_1 L_1 \end{matrix}\right\rangle \psi_l(n-1)\right]^{L'} \psi_l(n)\right]^L_M \\
&= \sum_{\alpha' L' \alpha_1 L_1 L_2} C^{[\nu],\alpha l}_{[\nu]\alpha' L',[1]l} C^{[\nu'],\alpha' L'}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]l} U(L_1 lLl;\ L'L_2) \left[\left|\begin{matrix} l^{n-2}[\nu_1] \\ m_1\omega_1^0,\ \alpha_1 L_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} l^2[\nu_2] \\ m_2\omega_2^0 \alpha_2 L_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^L_M \\
&\quad \cdot C^{[\nu_1]L_2}_{[1]l,[1]l},
\end{aligned}
\tag{7-169}
$$

式中$[\nu_2]=[2]$或$[11]$为一维表示，$m_2=1$，以下略去． 令(7-167)式中$n_2=2$，再和(7-169)式比较，得到双粒子母分系数的表达式[1)]

$$
C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[\nu_2]L_2} = \left\langle \begin{matrix} [\nu] \\ m \end{matrix} \middle| [\nu], \begin{matrix} [\nu_1]\ [\nu_2] \\ m_1 \end{matrix} \right\rangle^{-1} \sum_{\alpha' L'} C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu']\alpha' L',[1]l} C^{[\nu']\alpha' L'}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]l} U(L_1 lLl;\ L'L_2).
\tag{7-170}
$$

注意双粒子母分系数和量子数m_1的选取无关．

例　$1p$壳．取(i) $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \ & \ & \ & 5 \\ \hline \ & 6 \\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle$，$[\nu']=[41]$

(ii) $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rangle = \left|\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \ & \ & \ & 6 \\ \hline \ & 5 \\ \cline{1-2}\end{array}\right\rangle$，$[\nu']=[32]$

$$
\begin{aligned}
&\text{(i)}\quad C^{[42],\alpha L}_{[31]L_1,[2]L_2} = \left(\sqrt{\frac{\sigma-1}{2\sigma}}\right)^{-1} \sum_{L'} C^{[42],\alpha L}_{[41]L',[1]1} C^{[41],L'}_{[31]L_1,[1]1} U(L_1 1L1;\ L'L_2), \\
&\text{(ii)}\quad C^{[42],\alpha L}_{[31]L_1,[2]L_2} = \left(\sqrt{\frac{\sigma+1}{2\sigma}}\right)^{-1} \sum_{L'} C^{[42],\alpha L}_{[32]L',[1]1} C^{[32],L'}_{[31]L_1,[1]1} U(L_1 1L1;\ L'L_2).
\end{aligned}
\tag{7-171}
$$

这里利用了(4-184)式．σ为轴距(上式中$\sigma=3$)．利用单粒子母分系数(Jahn 1951)容易验证，由(i)和(ii)算出的双粒子母分系数是一样的．

对于j-j耦合，常常取$SU_{2j+1}\supset SP_{2j+1}\supset SO_3$分类基．类似于(7-166)，现在有：

$$
\left|\begin{matrix} [\nu] \\ \nu_1 m_1 \nu_2 m_2,\ \alpha JM \end{matrix}\right\rangle = \sum_{\alpha_1 J_1 \alpha_2 J_2} C^{[\nu]\alpha J}_{\nu_1\alpha_1 J_1,\nu_2\alpha_2 J_2} \left[\left|\begin{matrix} j^{n_1}[\nu_1] \\ m_1\omega_0^1,\ \alpha_1 J_1 \end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix} j^{n_2}[\nu_2] \\ m_2\omega_0^2,\ \alpha_2 J_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^J_M.
\tag{7-172}
$$

这里α为SP_{2j+1}群的不可约表示的指标(通常取为先辈数(seniority)，见de-Shalit和Talmi)．由于现在杨图$[\nu_1]$，$[\nu_2]$和$[\nu]$至多只有两列，根据Liltlewood规则可知这里多重性指标τ是多余的．这里的$SU_{2j+1}\supset SP_{2j+1}\supset SO_3$ ISF即为j-j耦合下的多粒子母分系数．

$$
(j^{n_1}[\nu_1]\alpha_1 J_1,\ j^{n_2}[\nu_2]\alpha_2 J_2|\}j^n[\nu]\alpha J) = C^{[\nu]\alpha J}_{\nu_1\alpha_1 J_1,\nu_2\alpha_2 J_2}
\tag{7-173}
$$

进一步的讨论见de-Shalit和Talmi的书．

3．自旋-同位旋母分系数

(1) 单粒子母分系数

类似于(7-159b)式，现在有

$$
\left|\begin{matrix} \gamma^n[\tilde{\nu}] \\ \tilde{m},\ \beta STM_S M_T \end{matrix}\right\rangle = \sum_{\beta_1 S_1 T_1} C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,[1]\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \left[\left|\begin{matrix} \gamma^{n-1}[\tilde{\nu}_1] \\ \tilde{m}_1,\ \beta_1 S_1 T_1 \end{matrix}\right\rangle \psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}(n)\right]^{ST}_{M_S M_T}.
\tag{7-174}
$$

上式左边为S_n群的IR基$[\tilde{\nu}]\tilde{m}$，$SU_4\supset SU_2\times SU_2$的$IR$基$[\tilde{\nu}]ST$．$SU_4\supset SU_2\times SU_2$的

1) 贝衣曼书上(15.30)式只有当n和$n-1$处于同一行或同一列时才适用，这时$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu]\begin{matrix}[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m_1\end{matrix}\right\rangle=1$．

ISF 就是自旋-同位旋空间的母分系数，一般书上常记为

$$(\gamma^{n-1}[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ \gamma|\}\gamma^n[\tilde{\nu}]\beta ST) = C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ [1]1/2\ 1/2}. \tag{7-175}$$

(2) 多粒子母分系数

类似于(7-166)式，现在有

$$\left|\begin{matrix} [\tilde{\nu}] \\ \tau\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2,\ \beta STM_S M_T \end{matrix}\right\rangle = \sum_{\beta_1 S_1 T_1 \beta_2 S_2 T_2} C^{[\tilde{\nu}]\tau,\ \beta ST}_{\tilde{\nu}_1\beta_1 S_1 T_1,\ \tilde{\nu}_2\beta_2 S_2 T_2}\left[\left|\begin{matrix} \gamma^{n_1}[\tilde{\nu}_1] \\ \tilde{m}_1\omega_1^0,\ \beta_1 S_1 T_1 \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} \gamma^{n_2}[\tilde{\nu}_2] \\ \tilde{m}_2\omega_2^0,\ \beta_2 S_2 T_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^{ST}_{M_S M_T}. \tag{7-176}$$

多粒子母分系数常记为

$$(\gamma^{n-n_2}[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ \gamma^{n_2}[\tilde{\nu}_2]\beta_2 S_2 T_2|\}\gamma^n[\tilde{\nu}]\beta ST) = C^{[\tilde{\nu}],\ \beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2 S_2 T_2}. \tag{7-177}$$

(3) 双粒子母分系数

类似于(7-170)式，有

$$C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2 T_2} = \left\langle\begin{matrix} [\tilde{\nu}] \\ \tilde{m} \end{matrix}\right|\left.\begin{matrix} [\tilde{\nu}],\ \ [\tilde{\nu}_1]\ [\tilde{\nu}_2] \\ \tilde{m}_1 \end{matrix}\right\rangle^{-1} \sum_{\beta' S' T'} C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}']\beta' S' T',\ [1]1/2\ 1/2}$$

$$\cdot C^{[\tilde{\nu}']\beta' S' T'}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,\ [1]1/2\ 1/2} U\left(S_1 \frac{1}{2} S \frac{1}{2};\ S' S_2\right) U\left(T_1 \frac{1}{2} T \frac{1}{2}; T' T_2\right). \tag{7-178}$$

容易将自旋-同位旋空间的 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ 的母分系数推广到 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 情形。利用(3-302)式，对于 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 分类基有

$$\left|\begin{matrix} \gamma^n[\tilde{\nu}] \\ \tau\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2,\ \beta[\mu]IYI_z,\ SS_z \end{matrix}\right\rangle = \sum C^{[\tilde{\nu}]\tau,\ \beta[\mu]\theta S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]S_2}$$

$$\cdot C^{[\mu]\theta IY}_{[\mu_1]I_1 Y_1,\ [\mu_2]I_2 Y_2}\left[\left|\begin{matrix} \gamma^{n_1}[\tilde{\nu}_1] \\ \tilde{m}_1\omega_1^0,\ \beta_1[\mu_1]I_1 Y_1 S_1 \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} \gamma^{n_2}[\tilde{\nu}_2] \\ \tilde{m}_2\omega_2^0,\ \beta_2[\mu_2]I_2 Y_2 S_2 \end{matrix}\right\rangle\right]^{IYS}_{I_z S_z}, \tag{7-179}$$

上式对 $\beta_1[\mu_1]S_1 I_1 Y_1 \beta_2[\mu_2]S_2 I_2 Y_2 \theta$ 求和，式中 $Y = Y_1 + Y_2$. 令

$$C^{[\tilde{\nu}]\tau,\ \beta[\mu],\ IYS}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]I_1 Y_1 S_1;\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]I_2 Y_2 S_2} = \sum_{\theta} C^{[\tilde{\nu}]\tau,\ \beta[\mu]\theta S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]S_2} C^{[\mu]\theta IY}_{[\mu_1]I_1 Y_1,\ [\mu_2]I_2 Y_2}. \tag{7-180}$$

(7-180)式左边是 $SU_6 \supset (SU_2^I \otimes U_1) \times SU_2^S$ 的 ISF，将它和(3-302)式中的 $C^{[\nu]\tau,\ \beta\Lambda\theta}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\ \nu_2\beta_2\Lambda_2}$ 相对照，可知后者附加量子数 $\beta \to \beta[\mu]$，子群不可约表示的标志 $\Lambda \to IYS$，而 θ 为多余的(因为 SU_2 为简单可约群)。比较(7-180)式和(7-156)式、(7-148)式，可看到 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 的 CG 系数的各种因式分解方法.

对于双粒子母分系数，类似于(7-178)式，有：

$$C^{[\tilde{\nu}],\ \beta[\mu]S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]S_2} = \left\langle\begin{matrix} [\tilde{\nu}] \\ \tilde{m} \end{matrix}\right|\left.\begin{matrix} [\tilde{\nu}],\ \ [\tilde{\nu}_1]\ [\tilde{\nu}_2] \\ \tilde{m}_1 \end{matrix}\right\rangle^{-1} \sum_{\beta'\mu' S'} C^{[\tilde{\nu}],\ \beta[\mu]S}_{[\tilde{\nu}']\beta'[\mu']S',\ [1]}$$

$$\cdot C^{[\tilde{\nu}'],\ \beta'[\mu']S'}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,\ [1]} U\left(S_1 \frac{1}{2} S \frac{1}{2}; S' S_2\right) U([\mu_1][1][\mu][1];\ [\mu'][\mu_2]). \tag{7-181}$$

式中最后一个因子为 SU_3 群拉卡系数(见 § 7.14).

4. 总母分系数

从(7-108)式出发，利用(4-168b)式，(4-180a)式和(4-171b)式，可将 n 个粒子的全反对称波函数表为

$$\left|\begin{matrix} l^n[\nu] \\ \alpha\beta LSTM_S M_T \end{matrix}\right\rangle^{\text{反}} = \sum_{\tau\nu_1 m_1 \nu_2 m_2} \frac{\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_1}_{m_2}}{\sqrt{h_\nu}}\left|\begin{matrix} l^n[\nu] \\ \tau\nu_1 m_1 \nu_2 m_2,\ \alpha LM \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} \gamma^n[\tilde{\nu}] \\ \tau\tilde{\nu}_1\tilde{m}_1\tilde{\nu}_2\tilde{m}_2,\ \beta STM_S M_T \end{matrix}\right\rangle. \tag{7-182}$$

将(7-166)式和(7-176)式代入上式得到

$$\left|\begin{matrix} l^n[\nu] \\ \alpha\beta LSTMM_SM_T \end{matrix}\right\rangle^{\text{反}} = \sum (l^{n-2}[\nu_1]\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1,\ l^{n_2}[\nu_2]\alpha_2\beta_2L_2S_2T_2 |\} l^n[\nu]\alpha\beta LST)$$

$$\cdot \left[\left|\begin{matrix} l^{n-n_2}[\nu_1] \\ \alpha_1\beta_1L_1S_1T_1 \end{matrix}\right\rangle^{\text{反}}_{\omega_1} \left|\begin{matrix} l^{n_2}[\nu_2] \\ \alpha_2\beta_2L_2S_2T_2 \end{matrix}\right\rangle^{\text{反}}_{\omega_2} \right]^{LST}_{MM_SM_T}. \tag{7-183}$$

上式对 $[\nu_1]\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1[\nu_2]\alpha_2\beta_2S_2T_2$ 求和. n 个粒子中分出 n_2 个粒子的总母分系数为:

$$(l^{n-n_2}[\nu_1]\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1,\ l^{n_2}[\nu_2]\alpha_2\beta_2L_2S_2T_2 |\} l^n[\nu]\alpha\beta LST)$$

$$= \sum_\tau \sqrt{\frac{h_{\nu_1}h_{\nu_2}}{h_\nu}}\, C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2} C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,[\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2}. \tag{7-184}$$

式中 $(h_{\nu_1}h_{\nu_2}/h_\nu)^{1/2}$ 称为权重因子. 由后面(7-244)式看到, 其实它是 $SU_{4(2l+1)} \supset SU_{2l+1} \times SU_4$ 的同位标量因子. 因此这里所谓总母分系数就是 $SU_{4(2l+1)} \supset (SU_{2l+1} \supset R_3) \times (SU_4 \supset SU_2 \times SU_2)$ 的 ISF, 利用拉卡引理(3-303)式及(7-244)式, 它可因式分解为:

$$C^{[1^n],[\nu]\alpha L[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[1^{n_1}][\nu_1]\alpha_1L_1[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,[1^{n_2}][\nu_2]\alpha_2L_2[\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2} = \sum_\tau \sqrt{\frac{h_{\nu_1}h_{\nu_2}}{h_\nu}}\, C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2} C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,[\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2} \tag{7-185}$$

由此看到 Racah 关于 ISF 的因式分解引理是何等重要, 利用该引理我们可直接写下(7-185)式而不需一步步推导. 关于总母分系数的进一步讨论见 § 7.16—§ 7.19.

5. 本征函数法计算母分系数

母分系数或 ISF 的计算方法很多, 这里只介绍本征函数法. 先更改记号, 将(7-159b)式写成

$$\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix} = \sum_{\alpha_1L_1} C^{[\nu],\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]} \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \alpha_1L_1 \end{pmatrix} \psi_l(n) \right]^L_M. \tag{7-186}$$

上式左边已是置换群 S_{n-1} 群的 IR 基 (ν_1m_1), 因此要求 $\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix}$ 为 S_n 群 IR 基 (νm), 就等价于要求 $\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix}$ 是 S_n 群二循环类算符 $C(n)$ 的本征函数. 类似于(4-191)式得到 $\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix}$ 满足的本征方程:

$$C'(n)\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix} = (\nu - \nu_1)\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \alpha L \end{pmatrix}, \tag{7-187}$$

$$C'(n) = \sum_{i=1}^{n-1} p_{in}.$$

由此可见, 将算符 $C'(n)$ 在基底 $\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \alpha_1L_1 \end{pmatrix} \psi_l(n) \right]^L_M$ (固定 ν_1, m_1, L) 上的矩阵表示对角化, 就可求出母分系数 $C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]}$. 为了求 $C'(n)$ 的矩阵元, 我们利用(7-159)式将 $(n-1)$ 个粒子的波函数展开. 置换 $p_{n,n-1}$ 的矩阵元可表为:

$$\left\langle \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \alpha_1L_1 \end{pmatrix} \psi_l(n) \right]^L_M \middle| p_{n,n-1} \middle| \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1'\alpha_2L_2 \end{pmatrix} \psi_l(n) \right]^L_M \right\rangle$$

$$= \sum_{\substack{\alpha'L' \\ \alpha''L''}} C^{[\nu_1],\alpha_1L_1}_{[\nu']\alpha'L',[1]} C^{[\nu_1],\alpha_2L_2}_{[\nu'']\alpha''L'',[1]} \left\langle \left[\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu'] \\ m',\ \alpha'L' \end{pmatrix} \psi_l(n-1) \right]^{L_1} \psi_l(n) \right]^L \middle| p_{n,n-1} \middle|\right.$$

$$\cdot\left[\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu''] \\ m'', \alpha''L'' \end{pmatrix}\psi_l(n-1)\right]^{L_2}\psi_l(n)\right]^L\Big\rangle$$

$$=\delta_{\nu'\nu''}\delta_{m'm''}\sum_{\alpha'L'}C^{[\nu_1],\alpha_1L_1}_{[\nu']\alpha'L',[1]}C^{[\nu_1],\alpha_2L_2}_{[\nu']\alpha'L',[1]}\langle L'L_1L|p_{n,n-1}|L'L_2L\rangle$$

$$=\delta_{m_1m_1'}\langle\alpha_1L_1|p_{n,n-1}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}\text{ 1)} \tag{7-188a}$$

这里利用了 $\delta_{\nu'\nu''}\delta_{m'm''}=\delta_{m_1m_1'}$（由置换群分支律即可知道这一点）．式中

$$\langle L'L_1L|p_{n,n-1}|L'L_2L\rangle=(-1)^{L'+L+L_1+L_2}U(lL'Ll;L_1L_2). \tag{7-188b}$$

（对于 $1p$ 壳（$l=1$），$\langle L'L_1L|p_{n,n-1}|L'L_2L\rangle$的数值表已由 Jahn 1951 给出．）

$$\langle\alpha_1L_1|p_{n,n-1}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}=\langle\alpha_2L_2|p_{n,n-1}|\alpha_1L_1\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}$$

$$=\sum_{\alpha'L'}C^{[\nu_1],\alpha_1L_1}_{[\nu']\alpha'L',[1]}C^{[\nu_1],\alpha_2L_2}_{[\nu']\alpha'L',[1]}\langle L'L_1L|p_{n,n-1}|L'L_2L\rangle. \tag{7-188c}$$

再利用 $p_{in}=p_{in-1}p_{n-1,n}p_{in-1}$ 和(7-188a)式得：

$$\langle\alpha_1L_1|p_{in}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}=\langle\alpha_2L_2|p_{in}|\alpha_1L_1\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}$$

$$=\left\langle\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1, \alpha_1L_1 \end{pmatrix}\psi_l(n)\right]^L_M\Big|p_{in-1}p_{nn-1}p_{in-1}\Big|\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1, \alpha_2L_2 \end{pmatrix}\psi_l(n)\right]^L_M\right\rangle$$

$$=\sum_{m_1'}[D^{[\nu_1]}_{m_1'm_1}(i,n-1)]^2\langle\alpha_1L_1|p_{nn-1}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1'}. \tag{7-188d}$$

由(7-186)式、(7-187)式和(7-188)立即得到母分系数所满足的本征方程

$$\sum_{\alpha_1L_1}[\langle\alpha_1L_1|C'(n)|\alpha_2L_2\rangle^L_{\nu_1}-\delta_{\alpha_1\alpha_2}\delta_{L_1L_2}(\nu-\nu_1)]C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]}=0, \tag{7-189a}$$

$$\langle\alpha_1L_1|C'(n)|\alpha_2L_2\rangle^L_{\nu_1}=\sum_{i=1}^{n-1}\langle\alpha_1L_1|p_{in}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}. \tag{7-189b}$$

注意，虽然上式右方求和号内每一项都和 m_1 有关，但它们的和却与 m_1 无关，只和 ν_1 有关．利用(7-188d)式可证明：

$$\langle\alpha_1L_1|C'(n)|\alpha_2L_2\rangle^L_{\nu_1}=\frac{n-1}{h_{\nu_1}}\sum_{m_1}\langle\alpha_1L_1|p_{nn-1}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{\nu_1m_1}. \tag{7-189c}$$

因此计算母分系数时，m_1 可取任一许可值．

由(7-189a)的系数行列式为零，可定出本征值 ν．如果 ν 为单根，则表明附加指标 α 为多余的，若 ν 为 τ 重根，则对该 ν 值，由(7-189)式可得到 τ 组解 $C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[1]}$，$\alpha=1, 2, \cdots, \tau$．选取适当的线性组合，可使不同的 α 的解满足正交性(7-161)式．

(7-189)式和(7-188c)式给出了计算母分系数的递推方法．这一方法比 Jahn 的方法要简单一些．

例 1 求 $1p$ 壳 $n=3$，$[\nu_1]=2$，$L=1$ 的母分系数．

因为$[\nu_1]=2$ 中包含 $L_1=0, 2$，现在要将 $C'(3)$在 $\varphi_1=[|[2]S\rangle\psi(3)]^P$ 和 $\varphi_2=[|[2]D\rangle\cdot\psi(3)]^P$ 的基上的矩阵对角化．由于两个粒子分出一个的母分系数等于 1，因此由(7-188c)式可知现在矩阵元

$$\langle\alpha_1L_1|p_{23}|\alpha_2L_2\rangle^{(L)}_{[2]}=\langle PL_1P|p_{23}|PL_2P\rangle.$$

用拉卡系数表可得到矩阵$\langle PL_1P|p_{23}|PL_2P\rangle$（见 Jahn 和 Wieringen，表 1）：

---

1) 当 $[\nu_1]\neq[\nu_1']$ 时，$m_1\neq m_1'$ 的矩阵元$\left\langle\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1, \alpha_1L_1 \end{pmatrix}\psi_l(n)\right]^L_M\Big|p_{n,n-1}\Big|\left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1'] \\ m_1', \alpha_2L_2 \end{pmatrix}\psi_l(n)\right]^L_M\right\rangle$可以不为零，见 Jahn，(1951) 第 5 节．

$PL_1 \backslash PL_2$	PS	PD
PS	$\frac{1}{3}$	$\frac{\sqrt{5}}{3}$
PD	$\frac{\sqrt{5}}{3}$	$\frac{1}{6}$

现在本征值 $\nu_1=1$. 由 (7-188d) 式得到 $\langle PL_1P|p_{13}|PL_2P\rangle=\langle PL_1P|p_{23}|PL_2P\rangle$, 所以(7-189a)式变为

$$\begin{pmatrix} \frac{5}{3}-\nu, & \frac{2\sqrt{5}}{3} \\ \frac{2\sqrt{5}}{3}, & \frac{4}{3}-\nu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C^{[\nu]P}_{[2]S,[1]} \\ C^{[\nu]P}_{[2]D,[1]} \end{pmatrix}=0. \tag{7-190}$$

由此解得单根 $\nu=0$ (对应于[21]表示)和 $\nu=3$ (对应于[3]表示), 在此情形指标 α 是多余的. 将本征值代入方程(7-190), 再利用归一条件就可求出母分系数 $C^{[\nu]L}_{[\nu_1]L_1,[1]}$, 列在下表.

$[\nu]L \backslash [\nu_1]L_1$	$[2]S$	$[2]D$
$[3]P$	$\frac{\sqrt{5}}{3}$	$\frac{2}{3}$
$[21]P$	$\frac{2}{3}$	$-\frac{\sqrt{5}}{3}$

因此针对本例, (7-159b)式可写成

$$\left|\boxed{1\,|\,2\,|\,3},\ PM\right\rangle=\left[\left(\frac{\sqrt{5}}{3}\left|\boxed{1\,|\,2},\ S\right\rangle+\frac{2}{3}\left|\boxed{1\,|\,2},\ D\right\rangle\right)\psi(3)\right]^{P}_{M'} \tag{7-191a}$$

$$\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \cline{1-1}\end{array},\ PM\right\rangle=\left[\left(\frac{2}{3}\left|\boxed{1\,|\,2},\ S\right\rangle-\frac{\sqrt{5}}{3}\left|\boxed{1\,|\,2},\ D\right\rangle\right)\psi(3)\right]^{P}_{M'} \tag{7-191b}$$

将上式简写成(7-159c)的形式为

$$|[3]P\rangle=\left(\frac{\sqrt{5}}{3}|[2]S\rangle+\frac{2}{3}|[2]D\rangle\right)\psi(3). \tag{7-191c}$$

$$|[21]P\rangle=\left(\frac{2}{3}|[2]S\rangle-\frac{\sqrt{5}}{3}|[2]D\rangle\right)\psi(3). \tag{7-191d}$$

$n=3$ 的其它母分系数都十分简单, 从角动量耦合规则就可判断它要末为零, 要末为 1, 例如

$$|[21]D\rangle=C_1[|[2]D\rangle\psi_p(3)]^D+C_2[|[2]S\rangle\psi_p(3)]^D=[|[2]D\rangle\psi_p(3)]^D. \tag{7-192a}$$

这里因为 S 态和 P 态不可能耦合成 D 态, 所以 $C_2=0$. 类似地有

$$|[21]D\rangle=[|[11]P\rangle\psi(3)]^D,\quad |[21]P\rangle=[|[11]P\rangle\psi(3)]^P. \tag{7-192b}$$

例 2 1p 壳, $n=4$, $[\nu_1]=[21]$, 取 $L=D$.

由 Bohr 书表 IC-4 知[21]表示中包含 $L_1=P,\ D$. 因此现在要把 $C'(4)$ 在基($\varphi_1,\ \varphi_2$)或($\chi_1,\ \chi_2$)上的矩阵对角化:

$$\varphi_1=\left[\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},\ P\right\rangle\psi(4)\right]^D,\quad \varphi_2=\left[\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},\ D\right\rangle\psi(4)\right]^D,$$
$$\chi_1=\left[\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},\ P\right\rangle\psi(4)\right]^D,\quad \chi_2=\left[\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},\ D\right\rangle\psi(4)\right]^D. \qquad (7\text{-}193\text{a})$$

引入记号

$$|L'L_1L\rangle=\left[\left[\psi\begin{pmatrix}[\nu']\\ m',\ \alpha'L'\end{pmatrix}\psi_l(n-1)\right]^{L_1}\psi_l(n)\right]^L, \qquad (7\text{-}194)$$

并利用 $n=3$ 的母分系数(7-191b)式及(7-192)式，将(7-193a)式中的三粒子态展开，得到

$$\varphi_1=\frac{2}{3}|SPD\rangle-\frac{\sqrt{5}}{3}|DPD\rangle,\quad \varphi_2=|DDD\rangle$$
$$\chi_1=|PPD\rangle,\qquad\qquad \chi_2=|PDD\rangle \qquad (7\text{-}193\text{b})$$

由(7-188b)式，或由 Jahn et al 表 1 可求出 p_{34} 在$(\varphi_1,\ \varphi_2)$和$(\chi_1,\ \chi_2)$基上的表示矩阵

$$(\langle\alpha_1L_1|p_{34}|\alpha_2L_2\rangle_{[21]m_1=1})=\mathscr{D}_1(34)=\begin{pmatrix}1/2 & -\sqrt{3}/6\\ -\sqrt{3}/6 & 5/6\end{pmatrix}.$$
$$(\langle\alpha_1L_1|p_{34}|\alpha_2L_2\rangle_{[21]m_1=2})=\mathscr{D}_2(34)=\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & -1/2\end{pmatrix}. \qquad (7\text{-}195)$$

由(7-189c)式和(7-195)式，得到算符 $C'(4)$ 在基$(\varphi_1,\ \varphi_2)$和$(\chi_1,\ \chi_2)$上的矩阵表示：

$$\mathscr{D}_1(C'(4))=\mathscr{D}_2(C'(4))=\begin{pmatrix}3/2 & \sqrt{3}/2\\ \sqrt{3}/2 & 1/2\end{pmatrix}. \qquad (7\text{-}196)$$

将(7-196)式对角化立即求得母分系数$(p^3,\ p|\}p^4)=C^{[\nu]L}_{[\nu_1]L_1,[1]}$：

$[\nu]L$ \ $[\nu_1]L_1$	$[21]P$	$[21]D$
$[31]D$	$\sqrt{3}/2$	$1/2$
$[22]D$	$-1/2$	$\sqrt{3}/2$

或写成

$$\left|\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3&\multicolumn{2}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},\ DM\right\rangle=\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},P\right\rangle+\frac{1}{2}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},D\right\rangle\right)\psi(4),$$
$$\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array},\ DM\right\rangle=\left(-\frac{1}{2}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},P\right\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&\multicolumn{1}{c}{}\\\cline{1-1}\end{array},D\right\rangle\right)\psi(4). \qquad (7\text{-}197\text{a})$$

简写为

$$|[31]D\rangle=\left(\frac{\sqrt{3}}{2}|[21]P\rangle+\frac{1}{2}|[21]D\rangle\right)\psi(4),$$
$$|[22]D\rangle=\left(-\frac{1}{2}|[21]P\rangle+\frac{\sqrt{3}}{2}|[21]D\rangle\right)\psi(4). \qquad (7\text{-}197\text{b})$$

以上方法容易推广到求其它 $SU_n\supset G$ 的母分系数．例如：

(1) $SU_3\supset SU_2$

和(7-186)式相应的式子为

$$\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ IYI_z \end{pmatrix} = \sum_{I_1Y_1} C^{[\nu]IY}_{[\nu_1]I_1Y_1,[1]} \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ I_1Y_1 \end{pmatrix} \psi(n) \right]^{I}_{I_z}, \tag{7-198}$$

式中 $\nu_1 m_1 IY$ 是固定的. $[\nu]$也可用$(\lambda\mu)$标志($[\nu]=[\lambda+\mu,\ \mu]$).

(7-188c)式中的矩阵元

$$\begin{aligned} &\langle \alpha_1 L_1 | p_{n-1,n} | \alpha_2 L_2 \rangle^L \to \langle I_1 Y_1 | p_{n-1,n} | I_2 Y_2 \rangle^I \\ &= \sum_{I'Y'} C^{[\nu_1]I_1Y_1}_{[\nu']I'Y',[1]} C^{[\nu_1]I_2Y_2}_{[\nu']I'Y',[1]} \langle I' I_1 I | p_{n-1,n} | I' I_2 I \rangle. \end{aligned} \tag{7-199}$$

(2) $SU_4 \supset SU_3 \times SU_2$

$$\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \beta ST M_S M_T \end{pmatrix} = \sum_{\beta_1 S_1 T_1} C^{[\nu]\beta ST}_{[\nu_1]\beta_1 S_1 T_1,[1]} \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \beta_1 S_1 T_1 \end{pmatrix} \psi(n) \right]^{ST}_{M_S M_T}, \tag{7-200}$$

$$\begin{aligned} &\langle \alpha_1 L_1 | p_{n-1,n} | \alpha_2 L_2 \rangle \to \langle \beta_1 S_1 T_1 | p_{n-1n} | \beta_2 S_2 T_2 \rangle \\ &= \sum_{\beta' S' T'} C^{[\nu_1]\beta_1 S_1 T_1}_{[\nu']\beta' S' T',[1]} C^{[\nu_1]\beta_2 S_2 T_2}_{[\nu']\beta' S' T',[1]} \langle S' S_1 S | p_{n-1n} | S' S_2 S \rangle \langle T' T_1 T | p_{n-1n} | T' T_2 T \rangle. \end{aligned} \tag{7-201}$$

(3) $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$

$$\psi\begin{pmatrix} [\nu] \\ m,\ \beta(\lambda\mu) S \end{pmatrix} = \sum_{\beta_1(\lambda_1\mu_1)S_1\theta} C^{[\nu]\beta(\lambda\mu)\theta S}_{[\nu_1]\beta_1(\lambda_1\mu_1)S_1,[1]} \left[\psi\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ m_1,\ \beta_1(\lambda_1\mu_1) S_1 \end{pmatrix} \psi(n) \right]^{(\lambda\mu)\theta S}. \tag{7-202}$$

和(7-179)相比，这里省略了$(\lambda\mu)$和 S 的分量指标，因为 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 的母分系数和这些量子数无关.

$$\begin{aligned} &\langle \alpha_1 L_1 | p_{n-1,n} | \alpha_2 L_2 \rangle^L \to \langle \beta_1 (\lambda_1\mu_1) S_1 | p_{n-1,n} | \beta_2 (\lambda_2\mu_2) S_2 \rangle^{(\lambda\mu)S} \\ &= \sum_{\beta'(\lambda'\mu')S'} C^{[\nu_1]\beta_1(\lambda_1\mu_1)S_1}_{[\nu']\beta'(\lambda'\mu')S',[1]} C^{[\nu_1]\beta_2(\lambda_2\mu_2)S_2}_{[\nu']\beta'(\lambda'\mu')S',[1]} \langle S' S_1 S | p_{n-1,n} | S' S_2 S \rangle \\ &\quad \cdot \langle (\lambda'\mu')(\lambda_1\mu_1)(\lambda\mu) | p_{n-1,n} | (\lambda'\mu')(\lambda_2\mu_2)(\lambda\mu) \rangle, \end{aligned} \tag{7-203}$$

式中

$$\begin{aligned} &\langle (\lambda'\mu')(\lambda_1\mu_1)(\lambda\mu) | p_{n-1,n} | (\lambda'\mu')(\lambda_2\mu_2)(\lambda\mu) \rangle \\ &= (-)^{\lambda'-\mu'+\lambda-\mu+\lambda_1-\mu_1+\lambda_2-\mu_2} U((10)(\lambda'\mu')(\lambda\mu)(10);\ (\lambda_1\mu_1)(\lambda_2\mu_2)). \end{aligned} \tag{7-204}$$

总之，若已知群 G 的拉卡系数，则利用本征函数法可求出 $SU_n \supset G$ 母分系数.

下面列出已有数值表或代数表达式或计算程序的各种类型的 ISF 的文献(这里仅列出部份文献的作者，刊名等见参考文献).

1. $SU_3 \supset SO_3$

单粒子母分系数数值表，Jahn(1951)；双粒子母分系数数值表，Elliott(1953)；$SU_3 \supset SO_3$ ISF 数值表，孙洪洲(1965)；

$SU_3 \supset SO_3$ ISF 代数表达式，Vergados (1968)，Horie (1964)；$SU_3 \supset SO_3$ ISF 计算程序，Akiyama 等(1973).

2. $SU_3 \supset SU_2 \otimes U_1$ ISF

数值表，Swart (1963)，McNamee (1964)(此文给出的是 $SU_3 \supset SU_2 \otimes U_1$ CG 系数)；代数表达式，Hecht (1965).

3. $SU_4 \supset SU_3 \otimes U_1$ ISF 数值表，Haacke (1976).

4. $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ 单粒子母分系数，Jahn (1951)；双粒子母分系数，Elliott 等(1953)，Harvey (1981)；代数式，Hecht (1969).

5. $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 数值表，So 和 Strottman(1979)，Dalitz(1981)，Machacek (1976)，Cook (1965)，张宗烨等[97](1977).

6. $SU_{mn} \supset SU_m \times SU_n$ 单粒子母分系数. 数值表 Chen 等(1983); 计算程序, Vallieres 等(1982).

$SU_{mn} \supset SU_m \times SU_n$ 双粒子和三粒子母分系数表. (施义晋等).

7. $SU_6 \supset SU_3$ ISF (对 s, d 壳), Hecht (1965); 计算程序, Braunschweig (1978).

8. $SU_{2j+1} \supset SP_{2j+1} \supset SO_3$ 全反对称表示和 $SU_{2l+1} \supset SO_{2l+1} \supset SO_3$ 全对称表示的单粒子母分系数. 数值表, Bayman 和 Lande (1966).

§7.14 $S_f \supset S_{f_1} \otimes S_{f_2} \otimes S_{f_3}$ 分类基和 SU_n 群拉卡系数*

本节内容和§7.10十分类似,差别仅在于酉群和置换群所扮演的角色对调了一下.

现在我们来构造 $S_f \supset S_{f_1} \otimes S_{f_2} \otimes S_{f_3}$ 分类基, $f = f_1 + f_2 + f_3$, $S_{f_i} \equiv S_{f_i}(\omega_i^0)$, (ω_1^0), (ω_2^0) 同(7-102a)式, $(\omega_3^0) = (f_1 + f_2 + 1, \cdots, f_1 + f_2 + f_3)$. 可以有两种方法来构造这种分类基:

(1) $S_f \supset (S_{f_1+f_2} \supset S_{f_1} \otimes S_{f_2}) \otimes S_{f_3}$ 分类基

由(7-102b)式,这种分类基可表为

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix} [\nu_{12}] & [\nu_3] \\ \nu_1 m_1 \nu_2 m_2, & m_3 \end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{12}\tau}$$

$$= \sum_{W_1 W_2 W_3 W_{12}} O^{[\nu_{12}]\tau_{12}, W_{12}}_{\nu_1 W_1, \nu_2 W_2} O^{[\nu]\tau, W}_{\nu_{12} W_{12}, \nu_3 W_3} \left|\begin{matrix}[\nu_1] \\ m_1\omega_1^0, \ W_1\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\nu_2] \\ m_2\omega_2^0, \ W_2\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ m_3\omega_3^0, \ W_3\end{matrix}\right\rangle. \quad (7\text{-}205a)$$

它是 SU_n 群 IR 基 $[\nu]W$, 属于 S_f 群和 $S_{f_1+f_2}$ 群 $IR[\nu]$ 和 $[\nu_{12}]$, 同时为 S_{f_i} 群 IR 基 $[\nu_i]m_i$.

(2) $S_f \supset S_{f_1} \otimes (S_{f_2+f_3} \supset S_{f_2} \otimes S_{f_3})$ 分类基

类似地可得到

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix} [\nu_1] & [\nu_{23}] \\ m_1, & \nu_2 m_2 \nu_3 m_3 \end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{23}\tau'}$$

$$= \sum_{W_1 W_2 W_3 W_{23}} O^{[\nu_{23}]\tau_{23}, W_{23}}_{\nu_2 W_2, \nu_3 W_3} O^{[\nu]\tau', W}_{\nu_1 W_1, \nu_{23} W_{23}} \left|\begin{matrix}[\nu_1] \\ m_1\omega_1^0, \ W_1\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\nu_2] \\ m_2\omega_2^0, \ W_2\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ m_3\omega_3^0, \ W_3\end{matrix}\right\rangle. \quad (7\text{-}205b)$$

分类基(7-205a)式和(7-205b)式之间相差一个幺正变换

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix} [\nu_{12}] & [\nu_3] \\ \nu_1 m_1 \nu_2 m_2, & m_3 \end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{12}\tau}$$

$$= \sum_{\nu_{23}\tau_{23}\tau'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3, \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} \left|\begin{matrix}[\nu] \\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix} [\nu_1] & [\nu_{23}] \\ m_1, & \nu_2 m_2 \nu_3 m_3 \end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{23}\tau'}, \quad (7\text{-}206a)$$

式中 U 为 SU_n 群拉卡系数, 其值和 W、m_1、m_2、m_3 无关. 因此如果我们不去注意置换群 S_{f_i}, 而只着眼于酉群,则(7-206a)式可写成大家在角动量理论中所熟悉的形式

$$|([\nu_1][\nu_2])[\nu_{12}], [\nu_3]; [\nu]W\rangle^{\tau_{12}, \tau}$$

$$= \sum_{\tau_{23}\nu_{23}\tau'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3; \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} |[\nu_1]([\nu_2][\nu_3])[\nu_{23}]; [\nu]W\rangle. \quad (7\text{-}206b)$$

由(7-205)式和(7-206)式得

$$U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3, \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} = \sum_{\text{固定}W} O^{[\nu_{12}]\tau_{12} W_{12}}_{\nu_1 W_1, \nu_2 W_2} O^{[\nu]\tau W}_{\nu_{12} W_{12}, \nu_3 W_3} O^{[\nu_{23}]\tau_{23}, W_{23}}_{\nu_2 W_2, \nu_3 W_3} O^{[\nu]\tau', W}_{\nu_1 W_1, \nu_{23} W_{23}} \quad (7\text{-}207)$$

置换群拉卡系数的公式(7-124)式至(7-130)式也适用于 SU_n 群拉卡系数, 只要将分量

指标 $m \to W$, $m_i \to W_i$, $\tau \to \beta$, 而 h_ν, h_{ν_i} 等理解为 SU_n 群的维数.

由于 SU_n 群 CG 系数可以因式分解，因此可将 SU_n 群拉卡系数表示成其子群 G_s 的拉卡系数和 $SU_n \supset G_s$ ISF 的乘积的线性组合. 取不同的分类基时，SU_n 群的 CG 系数是不同的，但 SU_n 群拉卡系数只和 SU_n 群不可约表示有关，和不可约表示的分量指标无关，所以取不同的分类基，给出的拉卡系数是一样的.

例 1　SU_3 群拉卡系数

a．取 $SU_3 \supset SU_2 \times U_1$ 分类基. 将(7-148)式代入(7-207)式，得

$$U(\mu_1\mu_2\mu\mu_3,\ \mu_{12}\mu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} = \sum_{W_1W_2W_3W_{12}W_{23}} U(I_1I_2II_3;\ I_{12}I_{23})\{CCCC\}, \tag{7-208a}$$

式中

$$\{CCCC\} = C^{[\mu_{12}]\tau_{12}W_{12}}_{\mu_1W_1,\mu_2W_2} C^{[\mu]\tau W}_{\mu_{12}W_{12},\mu_3W_3} C^{[\mu]\tau'W}_{\mu_1W_1,\mu_{23}W_{23}} C^{[\mu_{23}]\tau_{23},W_{23}}_{\mu_2W_2,\mu_3W_3}. \tag{7-208b}$$

而这里 $\overline{W} = IY$, $\overline{W}_i = I_iY_i$.

b．取 $SU_3 \supset SO_3 \supset SO_2$ 分类基(Vergados)

$$C^{[\mu]\tau\varkappa LM}_{[\mu_1]\varkappa_1L_1M_1,[\mu_2]\varkappa_2L_2M_2} = C^{[\mu]\tau\varkappa L}_{[\mu_1]\varkappa_1L_1,[\mu_2]\varkappa_2L_2} C^{LM}_{L_1M_1,L_2M_2}, \tag{7-209}$$

式中指标 $\varkappa$ 用来区分 SU_3 $IR[\mu]$ 中，SO_3 $IR(L)$ 出现不止一次的情形

$$U(\mu_1\mu_2\mu\mu_3;\ \mu_{12}\mu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} = \sum_{W_1W_2W_3W_{12}W_{23}} U(L_1L_2LL_3;\ L_{12}L_{23})\{CCCC\}, \tag{7-210}$$

式中 $\{CCCC\}$ 仍由(7-208b)式给出，但其中的 $\overline{W} = \varkappa L$, $\overline{W}_i = \varkappa_iL_i$.

如果多重性指标 τ_{12}, τ_{23}, τ, τ' 均只能取一个值，则由(7-208a)式和(7-210)式算出的 SU_3 群拉卡系数（除可能差一个位相外）必然相等. 如果多重性大于 1，且 $SU_3 \supset SU_2 \otimes U_1$ 分类基和 $SU_3 \supset SO_3 \supset SO_2$ 分类基中，多重性指标 τ 是各自独立规定的，则由(7-208a)式与(7-210)式算出的 SU_3 群拉卡系数可能不一样.

例 2　SU_4 拉卡系数

取 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ 分类基. 将(7-155)式代入(7-207)式得

$$\begin{aligned} &U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} \\ &= \sum_{W_1W_2W_3W_4} U(S_1S_2SS_3;\ S_{12}S_{23})U(T_1T_2TT_3;\ T_{12}T_{23})\{CCCC\}, \end{aligned} \tag{7-211a}$$

式中的 $\{CCCC\}$ 仍由(7-208b)式给出，但其中的 $\overline{W} = \beta ST$, $\overline{W}_i = \beta_iS_iT_i$, 类似于(7-130)式有

$$\begin{aligned} &\sum_{\tau'} U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\ \nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} C^{[\nu]\tau'W}_{\nu_1W_1,\nu_{23}W_{23}} \\ &= \sum_{W_2W_3W_{12}} U(S_1S_2SS_3;\ S_{12}S_{23})U(T_1T_2TT_3;\ T_{12}T_{23}) \\ &\quad \cdot C^{[\nu_{12}]\tau_{12}W_{12}}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2} C^{[\nu]\tau W}_{\nu_{12}W_{12},\nu_3W_3} C^{[\nu_{23}]\tau_{23}W_{23}}_{\nu_2W_2,\nu_3W_3}. \end{aligned} \tag{7-211b}$$

Draayer 等 (1973)、孙洪洲和韩其智 (1980) 讨论了 SU_3 群拉卡系数的计算，Hecht 和 Pang (1969) 讨论了 SU_4 群拉卡系数的计算. Каплан (1961) 讨论了 SU_n 群拉卡系数.

§7.15　$S_f \supset S_{f_1} \otimes S_{f_2} \otimes S_{f_3} \otimes S_{f_4}$ 分类基和 SU_n 群 9ν 系数*

1．令粒子数

$$f_{12} = f_1 + f_2,\quad f_{34} = f_3 + f_4,\quad f_{13} = f_1 + f_3,\quad f_{24} = f_2 + f_4,$$

$$f_{123} = f_{12} + f_3,\quad f = f_{12} + f_{34} = f_{13} + f_{24}, \tag{7-212a}$$

令四个正序列为

$$(\omega_1^0)=(12\cdots f_1),\qquad (\omega_2^0)=(f_1+1\cdots f_{12}),$$
$$(\omega_3^0)=(f_{12}+1\cdots f_{123}),\quad (\omega_4^0)=(f_{123}+1\cdots f). \tag{7-212b}$$

下面我们用 S_{f_i} 代表 $S_{f_i}(\omega_i^0)$.

可用以下两种方法得到 $S_f\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}\otimes S_{f_3}\otimes S_{f_4}$ 分类基

(1) $S_f\supset(S_{f_{12}}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2})\otimes(S_{f_{34}}\supset S_{f_3}\otimes S_{f_4})$ 分类基

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W_1\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}]\\ \nu_1m_1\nu_2m_2, & \nu_3m_3\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle\!\!\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}=\sum_{\substack{W_1W_2W_3W_4\\ W_{12}W_{34}}}O^{[\nu_{12}]\tau_{12},W_{12}}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}O^{[\nu_{34}]\tau_{34},W_{34}}_{\nu_3W_3,\nu_4W_4}$$
$$\cdot O^{[\nu]\tau,W}_{\nu_{12}W_{12},\nu_{34}W_{34}}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0, W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0, W_2\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3\omega_3^0, W_3\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_4]\\ m_4\omega_4^0, W_4\end{matrix}\right\rangle, \tag{7-213a}$$

上式左方为 SU_n 群 IR 基 $[\nu]W$, 属于 S_f, $S_{f_{12}}$, $S_{f_{34}}$ 群 $IR[\nu]$, $[\nu_{12}]$, $[\nu_{34}]$, 同时也是 S_{f_i} 群 IR 基 $[\nu_i]m_i$.

(2) $S_f\supset(S_{f_{13}}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_3})\otimes(S_{f_{24}}\supset S_{f_2}\otimes S_{f_4})$ 分类基

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}]\\ \nu_1m_1\nu_3m_3, & \nu_2m_2\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle\!\!\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\sum_{\substack{W_1W_2W_3W_4\\ W_{13}W_{24}}}O^{[\nu_{13}]\tau_{13}W_{13}}_{\nu_1W_1,\nu_3W_3}O^{[\nu_{24}]\tau_{24},W_{24}}_{\nu_2W_2,\nu_4W_4}$$
$$\times O^{[\nu]\tau'W}_{\nu_{13}W_{13},\nu_{24}W_{24}}\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0, W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0, W_2\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3\omega_0^3, W_3\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_4]\\ m_4\omega_4^0, W_4\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-213b}$$

这里我们用记号 $|\quad\gg$ 代表这个态, 以便和后面(7-218)式相区别. 分类基(7-213a)式和(7-213b)式之间相差一个幺正变换.

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}]\\ \nu_1m_1\nu_2m_2, & \nu_3m_3\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle\!\!\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}$$
$$=\sum_{\substack{\nu_{13}\nu_{24}\\ \tau_{13}\tau_{24}\tau'}}\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}]\\ \nu_1m_1\nu_3m_3, & \nu_2m_2\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle\!\!\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}. \tag{7-214a}$$

上式中右边第一个因子为 SU_n 群 9ν 系数(类似于 SU_2 群 $9j$ 系数). 其值和 W, $m_1\cdots m_4$ 无关, 因此若我们不去注意置换群, 而只着眼于酉群, 则(7-214a)式可写成

$$|(\nu_1\nu_2)\nu_{12},(\nu_3\nu_4)\nu_{34}:[\nu]W\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}$$
$$=\sum_{\substack{\nu_{13}\nu_{24}\tau'\\ \tau_{13}\tau_{24}}}\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}|(\nu_1\nu_3)\nu_{13},(\nu_2\nu_4)\nu_{24}:[\nu]W\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}. \tag{7-214b}$$

类似于(7-136)式可将 SU_n 群 9ν 系数表为其子群 G_s 的 9μ 系数和 $SU_n\supset G_s$ 的 ISF 的线性组合. 例如对 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 分类

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\sum_{\text{固定}\ \overline{W}}\begin{pmatrix}S_1 & S_2 & S_{12}\\ S_3 & S_4 & S_{34}\\ S_{13} & S_{24} & S\end{pmatrix}\begin{pmatrix}T_1 & T_2 & T_{12}\\ T_3 & T_4 & T_{34}\\ T_{13} & T_{24} & T\end{pmatrix}$$
$$\cdot O^{[\nu_{12}]\tau_{12},\overline{W}_{12}}_{\nu_1\overline{W}_1,\nu_2\overline{W}_2}O^{[\nu_{34}]\tau_{34},\overline{W}_{34}}_{\nu_3\overline{W}_3,\nu_4\overline{W}_4}O^{[\nu]\tau,\overline{W}}_{\nu_{12}\overline{W}_{12},\nu_{34}\overline{W}_{34}}O^{[\nu_{13}]\tau_{13}\overline{W}_{13}}_{\nu_1\overline{W}_1,\nu_3\overline{W}_3}O^{[\nu_{24}]\tau_{24}\overline{W}_{24}}_{\nu_2\overline{W}_2,\nu_4\overline{W}_4}O^{[\nu]\tau'\overline{W}}_{\nu_{13}\overline{W}_{13},\nu_{24}\overline{W}_{24}} \tag{7-215}$$

式中 $\overline{W}=\beta ST$, $\overline{W}_i=\beta_iS_iT_i$.

(7-134)式至(7-138)式也适用于 SU_n 群, 只要将指标 $m\to W$, $m_i\to W_i$. h_ν 等应理解为

SU_n 群 $IR[\nu]$ 的维数.

2. SU_n 群拉卡系数和 9ν 系数的计算

由于高阶酉群 CG 系数计算的困难,因此若要先算出 SU_n 群 CG 系数,然后再用(7-207)式和(7-134)等式来计算 SU_n 群拉卡系数和 9ν 系数是相当困难的,本节以及(9-26)式将给出另外两个计算方法.

先考虑 9ν 系数,定义置换算符

$$P=\begin{pmatrix}\omega_2^0 & \omega_3^0\\ \omega_3^0 & \omega_2^0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_1+1, & f_1+2, & \cdots, & f_{12}, & f_{12}+1, & \cdots, & f_{123}\\ f_{12}+1, & f_{12}+2, & \cdots, & f_{123}, & f_1+1, & \cdots, & f_{12}\end{pmatrix}. \tag{7-216}$$

例如, $f_1=2$, $f_2=3$, $f_3=4$, $f_{12}=5$, $f_{13}=6$, $f_{123}=9$,

$$P=\begin{pmatrix}3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9\\ 6 & 7 & 8 & 9 & 3 & 4 & 5\end{pmatrix}=(3695847).$$

令 $S'_{f_3}=S_{f_3}(\omega'_3)$, $S'_{f_2}=S_{f_2}(\omega'_2)$,

$$(\omega'_3)=(f_1+1,\ f_1+2,\ \cdots,\ f_{13}),\quad (\omega'_2)=(f_{13}+1,\ \cdots,\ f_{123}). \tag{7-217}$$

$S_f\supset(S'_{f_{13}}\supset(S_{f_1}\otimes S'_{f_3}))\otimes(S'_{f_{24}}\supset(S'_{f_2}\otimes S_{f_4}))$ 分类基记为:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W,\end{matrix}\begin{pmatrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}]\\ \nu_1m_1\nu_3m_3, & \nu_2m_2\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\sum_{\substack{W_1W_2W_3W_4\\ W_{13}W_{24}}}C^{[\nu_{13}]\tau_{13},W_{13}}_{\nu_1W_1,\nu_3W_3}C^{[\nu_{24}]\tau_{24},W_{24}}_{\nu_2W_2,\nu_4W_4}C^{[\nu]\tau'W}_{\nu_{13}W_{13},\nu_{24}W_{24}}$$

$$\cdot\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0, & W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega'_2, & W_2\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_3]\\ m_3\omega'_3, & W_3\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_4]\\ m_4\omega_4^0, & W_4\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-218}$$

注意 (7-218)式和(7-213)式的差别在于 $[\nu_2]$ 和 $[\nu_3]$ 的 IR 基中粒子的坐标编码不同,而其余量子数全都一样.利用(7-214a)式和(7-218)式,可将 9ν 系数表成

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\left\langle[\nu]\begin{pmatrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}]\\ \nu_1m_1\nu_2m_2, & \nu_3m_3\nu_4m_4\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}\right.$$

$$\cdot\left|\begin{pmatrix}\omega_2^0 & \omega_3^0\\ \omega_3^0 & \omega_2^0\end{pmatrix}\right|[\nu]\begin{pmatrix}[\nu_{13}] & [\nu_{24}]\\ \nu_1m_1\nu_3m_3, & \nu_2m_2\nu_4m_4\end{pmatrix}^{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}\Bigg\rangle, \tag{7-219}$$

式中省略了指标 W.利用置换群标准基到非标准基之间的表象变换系数,可将上式算符 P 的左右两边的非标准基变到标准基,

$$\left|[\nu]\begin{pmatrix}[\nu_{12}] & [\nu_{34}]\\ \nu_1m_1\nu_2m_2, & \nu_3m_3\nu_4m_4\end{pmatrix}\right\rangle^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}=\sum_{mm_{12}m_{34}}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|[\nu]\ \begin{matrix}\tau[\nu_{12}][\nu_{34}]\\ m_{12}\ \ m_{34}\end{matrix}\Bigg\rangle$$

$$\cdot\left\langle\begin{matrix}[\nu_{12}]\\ m_{12}\end{matrix}\right|[\nu_{12}],\ \begin{matrix}\tau_{12}[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m_1\ \ m_2\end{matrix}\Bigg\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{34}]\\ m_{34}\end{matrix}\right|[\nu_{34}],\ \begin{matrix}\tau_{34}[\nu_3]\ [\nu_4]\\ m_3\ \ m_4\end{matrix}\Bigg\rangle. \tag{7-220}$$

将上式右方指标 $2\leftrightarrow3$, 得到 S_f 非标准基(7-218)式到 S_f 群标准基的变换式, 再由(7-219)式、(7-220)式得 9ν 系数的表达式

$$\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\sum_{\substack{m_{12}m_{34}m\\ m_{13}m_{24}m'}}D^{[\nu]}_{mm'}(P)\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|[\nu],\ \begin{matrix}\tau[\nu_{12}][\nu_{34}]\\ m_{12}\ \ m_{34}\end{matrix}\Bigg\rangle$$

$$\cdot\left\langle\begin{matrix}[\nu_{12}]\\ m_{12}\end{matrix}\right|[\nu_{12}],\ \begin{matrix}\tau_{12}[\nu_1]\ [\nu_2]\\ m_1\ \ m_2\end{matrix}\Bigg\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{34}]\\ m_{34}\end{matrix}\right|[\nu_{34}],\ \begin{matrix}\tau_{34}[\nu_3]\ [\nu_4]\\ m_3\ \ m_4\end{matrix}\Bigg\rangle$$

$$\cdot\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m'\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau'[\nu_{13}][\nu_{24}]\\ m_{13}\ \ m_{24}\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{13}]\\ m_{13}\end{matrix}\middle|[\nu_{13}],\begin{matrix}\tau_{13}[\nu_1][\nu_3]\\ m_1\ \ m_3\end{matrix}\right\rangle$$

$$\cdot\left\langle\begin{matrix}[\nu_{24}]\\ m_{24}\end{matrix}\middle|[\nu_{24}],\begin{matrix}\tau_{24}[\nu_2][\nu_4]\\ m_2\ \ m_4\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-221a}$$

上式中置换算符 P 由(7-216)式给出，求和时保持 $m_1, \cdots, m_4$ 固定. 令 $f_3=0$, $[\nu_3]=[0]$, $P=e$(幺元素), 由(7-187)式和(7-221a)式得到 SU_n 群拉卡系数的表达式:

$$U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'}=\sum_{m_{12}m_{23}m}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau[\nu_{12}][\nu_3]\\ m_{12}\ \ m_3\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{12}]\\ m_{12}\end{matrix}\middle|[\nu_{12}],\begin{matrix}\tau_{12}[\nu_1][\nu_2]\\ m_1\ \ m_2\end{matrix}\right\rangle$$

$$\cdot\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau'[\nu_1][\nu_{23}]\\ m_1\ \ m_{23}\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{23}]\\ m_{23}\end{matrix}\middle|[\nu_{23}],\begin{matrix}\tau_{23}[\nu_2][\nu_3]\\ m_2\ \ m_3\end{matrix}\right\rangle, \tag{7-221b}$$

求和时保持 m_1, m_2, m_3 固定.

上式右方不明显依赖于 n, 于是我们得到一个重要结论: ***SU_n 群的 9ν 系数和拉卡系数不明显依赖于 n, 只和配分有关.***

置换群表象变换系数可用本征函数法(4-172)式计算，因此由(7-221)式可算出任意 n 时的 SU_n 群拉卡系数和 9ν 系数.

利用表象变换系数及 IR 矩阵元的对称性质(4-180)式、(4-67)式，由(7-221)式立即得到两个重要的对称性质

$$\begin{pmatrix}\tilde\nu_1 & \tilde\nu_2 & \tilde\nu_{12}\\ \tilde\nu_3 & \tilde\nu_4 & \tilde\nu_{34}\\ \tilde\nu_{13} & \tilde\nu_{24} & \tilde\nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}=\epsilon\cdot\begin{pmatrix}\nu_1 & \nu_2 & \nu_{12}\\ \nu_3 & \nu_4 & \nu_{34}\\ \nu_{13} & \nu_{24} & \nu\end{pmatrix}^{\tau_{12}\tau_{34}\tau}_{\tau_{13}\tau_{24}\tau'}, \tag{7-222a}$$

$$U(\tilde\nu_1\tilde\nu_2\tilde\nu\tilde\nu_3,\ \tilde\nu_{12}\tilde\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'}=\epsilon U(\nu_1\nu_2\nu\nu_3;\nu_{12}\nu_{23})^{\tau_{12}\tau}_{\tau_{23}\tau'} \tag{7-222b}$$

式中 $\epsilon=\pm1$ 决定于位相选择.

Hect 等(1975)讨论了 SU_3 和 SU_4 群 9ν 系数. Kukulin 等(1967)讨论了 SU_4 群 9ν 系数, Kramer 等(1969)讨论了 SU_n 群 9ν 系数.

§7.16 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数

1. $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数和置换群 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ ISF

§7.12 曾给出了计算单粒子母分系数的一种方法. 用该方法计算 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 母分系数时，需知道 SU_m 和 SU_n 群拉卡系数. 对 $m>3$ 的情形, SU_m 群拉卡系数表还没有，因此不能用这种方法. 本节将介绍另一种方法. 我们首先证明 (1) §4.19 的 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ ISF 就是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ f_2-粒子母分系数. (2) $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数的值不明显依赖于 m 和 n.

1. 类似于(4-197)式,引入以下记号代表3个酉群和9个置换群所对应的9个 IR:

$$\begin{pmatrix}\sigma' & \mu' & \nu'_{\beta'}\\ \sigma'' & \mu'' & \nu''_{\beta''}\\ \sigma_\theta & \mu_\varphi & \nu_{\tau,\beta}\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}SU_m & SU_n & SU_{mn}\\ SU_m & SU_n & SU_{mn}\\ SU_m & SU_n & SU_{mn}\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}S_{f_1}(x) & S_{f_1}(\xi) & S_{f_1}(q)\\ S_{f_2}(x) & S_{f_2}(\xi) & S_{f_2}(q)\\ S_f(x) & S_f(\xi) & S_f(q)\end{pmatrix} \tag{7-223}$$

作指标代换

$$\Delta\to\sigma\mu,\ m\to W_1W_2,\ \theta\to\theta\varphi,\ 1\to{}',\ 2\to{}''$$

由(3-302)式，(3-301)式和(3-307)式得到以下式子

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\tau\\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\beta'\sigma'\mu'\theta\\ \beta''\sigma''\mu''\varphi}} C^{[\nu]\tau,\,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\,\nu''\beta''\sigma''\mu''}\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{W_1W_2}. \tag{7-224a}$$

$$\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{W_1W_2}$$

$$=\sum_{W_1'W_2'W_1''W_2''} C^{[\sigma]\theta,\,W_1}_{\sigma'W_1',\,\sigma''W_1''}C^{[\mu]\varphi,\,W_2}_{\mu'W_2',\,\mu''W_2''}\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'W_1'\mu'W_2'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''W_1''\mu''W_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-225}$$

$$\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{W_1W_2}=\sum_{\nu\tau\beta} C^{[\nu]\tau,\,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\,\nu''\beta''\sigma''\mu''}\left|\begin{matrix}[\nu]\tau\\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-226}$$

(7-226)式为(7-224a)式之逆展开，(7-224a)式右方头一个因子为 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n\,ISF$，它和 W_1, W_2 无关，因此该式可简写为：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\tau\\ \beta\sigma\mu\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\beta'\sigma'\mu'\theta\\ \beta''\sigma''\mu''\varphi}} C^{[\nu]\tau,\,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\,\nu''\beta''\sigma''\mu''}\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}. \tag{7-224b}$$

将(7-224a)式右边两个基分别配上杨盘 $Y^{\nu'}_{m'}(\omega_1^0)$ 和 $Y^{\nu''}_{m''}(\omega_2^0)$，$(\omega_1^0)=(1,\ 2,\ \cdots,\ f_1)$，$(\omega_2^0)=(f_1+1,\ \cdots,\ f)$，这时它变成

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \tau\nu'm'\nu''m'',\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\beta'\sigma'\mu'\theta\\ \beta''\sigma''\mu''\varphi}} C^{[\nu]\tau,\,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\,\nu''\beta''\sigma''\mu''}$$

$$\times\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega_1^0,\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega_2^0,\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{W_1W_2}. \tag{7-227}$$

上式左边自然是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基，它属于 SU_{mn} 群 $IR[\nu]$. 由§7.2定理知道，它必属于 $S_f(q)$ 群的 $IR[\nu]$. (7-227)式右边 $\nu'm'\nu''m''$ 都为固定，因此它也是 $S_f(q)\supset S_{f_1}(q)\times S_{f_2}(q)$ 分类基.

利用(7-225)式将(7-227)式中最后一个因子展开得

$$(I)\equiv\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega_1^0,\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega_2^0,\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{W_1W_2}$$

$$=\sum_{W_1'W_2'W_1''W_2''} C^{[\sigma]\theta,\,W_1}_{\sigma'W_1',\,\sigma''W_1''}C^{[\mu]\varphi,\,W_2}_{\mu'W_2',\,\mu''W_2''}\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega_1^0,\ \beta'\sigma'W_1'\mu'W_2'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega_2^0,\ \beta''\sigma''W_1''\mu''W_2''\end{matrix}\right\rangle.$$

然后再用(7-106a)式将上式右边 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基展开

$$(I)=\sum_{\substack{W_1'W_2'W_1''W_2''\\ m_1'm_2'm_1''m_2''}} C^{[\sigma]\theta W_1}_{[\sigma']W_1',\,[\sigma'']W_1''}C^{[\mu]\varphi W_2}_{[\mu']W_2',\,[\mu'']W_2''}C^{[\nu']\beta'm'}_{[\sigma']m_1',\,[\mu']m_2'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{[\sigma'']m_1'',\,[\mu'']m_2''}$$

$$\cdot\left|\begin{matrix}[\sigma']\\ m_1'\omega_1^0,\ W_1'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu']\\ m_2'\omega_1^0,\ W_2'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\sigma'']\\ m_1''\omega_2^0,\ W_1''\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu'']\\ m_2''\omega_2^0,\ W_2''\end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{m_1'm_2'm_1''m_2''} C^{[\nu']\beta',\,m'}_{[\sigma']m_1',\,[\mu']m_2'}C^{[\nu'']\beta''m''}_{[\sigma'']m_1'',\,[\mu'']m_2''}\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma']m_1'[\sigma'']m_1'',\ W_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu']m_2'[\mu'']m_2'',\ W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-228}$$

最后一步利用了(7-102b)式. 比较(4-200)式，(4-199)式和(7-227)式，(7-228)式我们得到一个重要关系式：

$$C^{[\nu]\tau,\,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',\,[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=C^{[\nu]\beta,\,\tau[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{[\sigma]\theta\sigma'\sigma'',\,[\mu]\varphi\mu'\mu''}. \tag{7-229}$$

于是我们证明了 1. $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n\,ISF$（或说 f_2 个粒子的母分系数）就是 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes$

S_{f_1} ISF. 2. 因为后者和 m, n 无关,所以 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF 不明显依赖于 m 和 n.

将(7-229)式表成以下重迭积分形式,其意义可以看得更清楚.

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu] \\ \tau\nu'm'\nu''m'',\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix} \middle| \left[\middle| \begin{matrix}[\sigma] \\ \theta\sigma'\sigma'',\ W_1\end{matrix} \right\rangle \middle| \begin{matrix}[\mu] \\ \varphi\mu'\mu'',\ W_2\end{matrix} \left\rangle \right]^{[\nu']_{\beta'}\ [\nu'']_{\beta''}}_{m'\quad m''} \right\rangle$$

$$=\left\langle \begin{matrix}[\nu] \\ \tau\nu'm'\nu''m'',\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix} \middle| \left[\middle| \begin{matrix}[\nu'] \\ m',\ \beta'\sigma'\mu'\end{matrix} \right\rangle \middle| \begin{matrix}[\nu''] \\ m'',\ \beta''\sigma''\mu''\end{matrix} \left\rangle \right]^{[\sigma]_\theta[\mu]_\varphi}_{W_1W_2} \right\rangle. \tag{7-230}$$

令(7-229)式中 $[\nu'']=[\sigma'']=[\mu'']=[1]$, 略去多余指标 τ, θ, φ, β'', σ'', 和 μ'', 并利用(4-189b)式, 我们得到 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 单粒子母分系数的表达式:

$$C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[1]}=C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{[\sigma]\sigma',[\mu]\mu'}=\sum_{m_1'm_2'}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}. \tag{7-231a}$$

当指标 β' 为多余时, 上式简化为(4-189c)式, 即

$$C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{[\nu']\sigma'\mu',[1]}=C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}/C^{[\nu'],m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'} \tag{7-231b}$$

由(4-196g)式及上式得

$$C^{[1^n][\sigma][\tilde{\sigma}]}_{[1^{n-1}][\sigma'][\tilde{\sigma}'],[1]}=\sqrt{h_{\sigma'}/h_\sigma} \tag{7-232}$$

2. $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 多粒子母分系数的计算

由(4-168a)式和(4-92a)式得到

$$\left| \begin{matrix}[\nu]\beta \\ \tau\nu'm'\nu''m''\end{matrix} \right\rangle=\sum_{mm_1m_2}\left\langle \begin{matrix}[\nu] \\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ \begin{matrix}\tau\nu'\nu'' \\ m'm''\end{matrix} \right\rangle C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}\varphi^\sigma_{m_1}\psi^\mu_{m_2}. \tag{7-233}$$

应用 CG 系数的因式分解公式(4-189a)式 f_2 次, 我们得到

$$C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}=\sum_{\beta'}I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}, \tag{7-234a}$$

这里 I 为 $S_f\supset S_{f-1}$ ISF, $S_{f-1}\supset S_{f-2}$ ISF, $\cdots$和 $S_{f_1+1}\supset S_{f_1}$ ISF 的乘积之和,

$$I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}=\sum_{\bar{\beta}\bar{\bar{\beta}}\cdots\hat{\beta}}C^{\nu\beta,\bar{\nu}\bar{\beta}}_{\sigma\bar{\sigma},\mu\bar{\mu}}C^{\bar{\nu}\bar{\beta},\bar{\bar{\nu}}\bar{\bar{\beta}}}_{\bar{\sigma}\bar{\bar{\sigma}},\bar{\mu}\bar{\bar{\mu}}}\cdots C^{\hat{\nu}\hat{\beta},\nu'\beta'}_{\hat{\sigma}\sigma',\hat{\mu}\mu'}. \tag{7-234b}$$

这里 $[\sigma]m_1=[\sigma][\bar{\sigma}][\bar{\bar{\sigma}}]\cdots[\hat{\sigma}][\sigma']m_1'$; $[\mu]m_2=[\mu][\bar{\mu}][\bar{\bar{\mu}}]\cdots[\hat{\mu}][\mu']m_2'$.

注意, I 不但依赖于 ν, β, ν', β', σ, σ', μ 和 μ', 而且依赖于 m_1, m_2 和 m, 即依赖于杨盘 $Y^\sigma_{m_1}$, $Y^\mu_{m_2}$ 和 Y^ν_m 中数码 f, $f-1$, $\cdots$, f_1 所在的位置.

利用 CG 系数的正交性, 由(7-234a)式 I 可表为:

$$I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}=\sum_{m_1'm_2'}^{\text{固定 }m'}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'} \tag{7-234c}$$

利用(4-168b)式和(7-234)式, (7-233)式可化到

$$\left| \begin{matrix}[\nu]\beta \\ \tau\nu'm'\nu''m''\end{matrix} \right\rangle=\sum^{\text{固定 }m_1'm_2'}\left\langle \begin{matrix}[\nu] \\ m\end{matrix} \middle| [\nu],\ \begin{matrix}\tau\nu'\nu'' \\ m'm''\end{matrix} \right\rangle\left\langle \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\end{matrix} \middle| [\sigma]\ \begin{matrix}\theta\sigma'\sigma'' \\ m_1'm_1''\end{matrix} \right\rangle\left\langle \begin{matrix}[\mu] \\ m_2\end{matrix} \middle| [\mu]\ \begin{matrix}\varphi\mu'\mu'' \\ m_2'm_2''\end{matrix} \right\rangle$$

$$\times I^{\nu m\beta,\nu'\beta''}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}\left[\sum_{m_1'm_2'}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}\left| \begin{matrix}[\sigma] \\ \theta\sigma'm_1'\sigma''m_1''\end{matrix} \right\rangle\left| \begin{matrix}[\mu] \\ \varphi\mu'm_2'\mu''m_2''\end{matrix} \right\rangle\right], \tag{7-235a}$$

这里头一个和号对 m, m_1, m_2, m_1'', m_2'', σ'', μ'', β', θ 和 φ 求和, 求和时保持 m_1' 和 m_2' 不变. 推导上式时利用了以下事实: 表象变换系数及 $I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}$ 都不依赖于 m_1' 和 m_2'. (7-235a)式中的方括号项可表为:

$$[\quad]=\sum_{\nu''\beta''m''}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}\left[\left| \begin{matrix}[\sigma] \\ \theta\sigma'\sigma''\end{matrix} \right\rangle\left| \begin{matrix}[\mu] \\ \varphi\mu'\mu''\end{matrix} \right\rangle\right]^{[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{m'm''} \tag{7-235b}$$

将(7-235)式, 和(4-200)式相比较, 并利用(7-229)式, 最后得到 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 多

粒子母分系数的表达式:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\sum^{\text{固定 } m'm''m_1'm_2'}_{mm_1m_2m_1''m_2''} I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}$$

$$\times\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma],\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu]\begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-236a}$$

利用(7-234c)式,上式亦可表成

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\sum^{\text{固定 } m'm''}_{mm_1m_2m_1''m_2''} C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}$$

$$\times\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma],\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu]\begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-236b}$$

由(7-236a)式可以推知下式成立:

$$\sum_{\tau}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu]\begin{matrix}\tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\sum^{\text{固定 } m_1'm_2'}_{m_1m_2m_1''m_2''} I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}$$

$$\times\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma],\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu],\begin{matrix}\varphi[\mu'][\mu'']\\ m_2'\quad m_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-237}$$

当指标 τ 为多余时,由(7-237)式给出一个简化公式

$$C^{[\nu],\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\nu'\ \ \nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle^{-1}\sum^{\text{固定 } m_1'm_2'}_{m_1m_2m_1''m_2''} I^{\nu m\beta,\nu'\beta'}_{\sigma m_1\sigma',\mu m_2\mu'}$$

$$\times C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma]\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu]\begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-236c}$$

(7-236a) 式和 (7-236c)式提供了从单粒子母分系数计算多粒子母分系数的方便方法. 而(7-236b)式以及以下的简化公式,则用以从置换群 CG 系数计算多粒子母分系数.

a. 当多重性指标 τ 和 β' 都为多余时:

$$C^{[\nu],\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=\left[\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\nu'\ \ \nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle C^{[\nu']m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}\right]^{-1}$$

$$\times\sum^{\text{固定 } m_1'm_2'}_{m_1m_2m_1''m_2''} C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma]\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu]\begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-238a}$$

对于 θ, β' 为多余,或 φ, β' 为多余的情形,可利用对称性(7-242b)化到上述情形.

b. 当多重性指标 β' 为多余时:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=\left(C^{[\nu'],m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}\right)^{-1}\sum^{\text{固定 } m'm''m_1'm_2'}_{mm_1m_2} C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}$$

$$\times\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\begin{matrix}\tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m\end{matrix}\middle|[\sigma],\begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu],\begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-238b}$$

对多重性 β' 为多余的情形,可利用后面对称性(7-239a)化到上述情形.

对于双粒子母分系数,(7-236a)式和(7-236c)式简化为

$$C^{[\nu]\beta\sigma\mu}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\sigma''\mu''}=\langle[\nu]m\,|\,[\nu'']\rangle^{-1}\sum^{\text{固定 } m_1'm_2'}_{m_1m_2\bar{\beta}} C^{\nu\beta,\bar{\nu}\bar{\beta}}_{\sigma\bar{\sigma},\mu\bar{\mu}}C^{\bar{\nu}\bar{\beta},\nu'\beta'}_{\bar{\sigma}\sigma',\bar{\mu}\mu'}\langle[\sigma]m_1\,|\,[\sigma'']\rangle\langle[\mu]m_2\,|\,[\mu'']\rangle. \tag{7-238c}$$

这里 ν'', σ'' 和 μ'' 必须满足 $[\nu'']=[\sigma'']\times[\mu'']$. 上式中我们还用较简单的记号 $\langle[\nu]m\,|\,[\nu'']\rangle$

等代替$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], \begin{matrix}\nu'\nu''\\ m'\end{matrix}\right\rangle$等. (7-238c)式是 Harvey (1981, p. 325)给出的公式的一种简化形式. 他定义的 $\overline{K}$ 系数就是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 双粒子母分系数.

3. $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF 的对称性[1)]

由(3-328)～(3-330a)得到以下三个对称性:

(1) $C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\epsilon_1 C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu'']\beta''\sigma''\mu'',[\nu']\beta'\sigma'\mu'}$, (7-239a)

$\epsilon_1=\pm 1$ 为位相, 下同.

(2) $C^{[\nu]\tau\beta\sigma\mu}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\epsilon_2 C^{[\overline{\nu}]\tau,\beta\overline{\sigma}\overline{\mu}}_{[\overline{\nu}']\beta'\overline{\sigma}'\overline{\mu}',[\overline{\nu}'']\beta''\overline{\sigma}''\overline{\mu}''}$. (7-239b)

(3) $$\sqrt{\frac{h_\sigma(SU_m)h_\mu(SU_n)}{h_\nu(SU_{mn})}}\,C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\epsilon_3\sqrt{\frac{h_{\sigma'}(SU_m)h_{\mu'}(SU_n)}{h_{\nu'}(SU_{mn})}}\,C^{[\overline{\nu}'],\beta'\overline{\sigma}'\overline{\mu}'}_{[\overline{\nu}]\beta\overline{\sigma}\overline{\mu},[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}. \tag{7-240}$$

这里 $h_\sigma(SU_m)$ 为 SU_m 群的不可约表示的维数等等. $[\overline{\nu}]$, $[\overline{\sigma}]$ 和$[\overline{\mu}]$分别为$[\nu]$, $[\sigma]$和$[\mu]$的 cortragrodient 表示(即它们分别和$[\nu]$, $[\sigma]$, $[\mu]$合在一起构成 SU_{mn}, SU_m 和 SU_n 的恒等表示).

(4) 由(4-122)式, (4-123)式, (4-180a)式和(7-236b)式得到

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\epsilon_4 C^{[\nu]\tau,\beta[\tilde{\sigma}]\theta[\tilde{\mu}]\varphi}_{[\nu']\beta'\tilde{\sigma}'\tilde{\mu}',[\nu'']\beta''\tilde{\sigma}''\tilde{\mu}''}=\epsilon_5 C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta[\tilde{\sigma}]\theta[\mu]\varphi}_{[\tilde{\nu}']\beta'\tilde{\sigma}'\mu',[\tilde{\nu}'']\beta''\tilde{\sigma}''\mu''}$$
$$=\epsilon_6 C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta[\sigma]\theta[\tilde{\mu}]\varphi}_{[\tilde{\nu}']\beta'\sigma'\tilde{\mu}',[\tilde{\nu}'']\beta''\sigma''\tilde{\mu}''}. \tag{7-241}$$

这里$[\tilde{\sigma}]$为杨图$[\sigma]$的行列转置.

(5) 将(7-236b)式改写成以下形式:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\frac{1}{h_{\nu'}h_{\nu''}}\sum_{m'm''}\sum_{mm_1m_2m_1'm_1''}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2''}$$
$$\times\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix} \middle| [\nu], \begin{matrix}\tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle\left\langle \begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix} \middle| [\sigma]\ \begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle \begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix} \middle| [\mu]\ \begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-242a}$$

由(4-117)式和(7-242a)式可以证明

$$\sqrt{\frac{h_{\nu'}h_{\nu''}}{h_\nu}}\,C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\epsilon_7\sqrt{\frac{h_{\sigma'}h_{\sigma''}}{h_\sigma}}\,C^{[\sigma]\theta,\beta[\nu]\tau[\mu]\varphi}_{[\sigma']\beta'\nu'\mu',[\sigma'']\beta''\nu''\mu''}$$
$$=\epsilon_8\sqrt{\frac{h_{\mu'}h_{\mu''}}{h_\mu}}\,C^{[\mu]\varphi,\beta[\sigma]\theta[\nu]\tau}_{[\mu']\beta'\sigma'\nu',[\mu'']\beta''\sigma''\nu''}, \tag{7-242b}$$

这里 h_ν 等为置换群 S_f 的 $IR[\nu]$ 的维数.

(6) $C^{[\nu]\beta,[\sigma][\mu]}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[0][0][0]}=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\beta\beta'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{\mu\mu'}$, (7-243a)

$$C^{[0],[0][0]}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}=\sqrt{\frac{h_{\sigma'}(SU_m)h_{\mu'}(SU_n)}{h_{\nu'}(SU_{mn})}}\,\delta_{\nu'\overline{\nu}''}\delta_{\beta'\beta''}\delta_{\sigma'\overline{\sigma}''}\delta_{\mu'\overline{\mu}''}. \tag{7-243b}$$

(7) 由(4-203)式, (4-204)式得

$$C^{[\nu]\tau,[f][\mu]\varphi}_{[\nu'][f_1][\mu'],[\nu''][f_2][\mu'']}=\delta_{\nu\mu}\delta_{\nu'\mu'}\delta_{\nu''\mu''}\delta_{\tau\varphi}, \tag{7-243c}$$

$$C^{[\nu]\tau,[1^f][\mu]\varphi}_{[\nu'][1^{f_1}][\mu'],[\nu''][1^{f_2}][\mu'']}=\delta_{\nu\tilde{\mu}}\delta_{\nu'\tilde{\mu}'}\delta_{\nu''\tilde{\mu}''}\delta_{\tau\varphi}. \tag{7-243d}$$

(8) 由(7-243c, d)式和(7-242b)式得

$$C^{[f],[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[f_1]\sigma'\mu',[f_2]\sigma''\mu''}=\sqrt{\frac{h_{\sigma'}h_{\sigma''}}{h_\sigma}}\,\delta_{\sigma\mu}\delta_{\sigma'\mu'}\delta_{\sigma''\mu''}\delta_{\theta\varphi}. \tag{7-244a}$$

---

1) 当多重性指标 τ, θ, φ 为多余时, 以下对称性一定成立, 否则只有经过适当的线性组合后才能满足.

$$C^{[1^n],[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[1^{n'}]\sigma'\mu',[1^{n''}]\sigma''\mu''}=\sqrt{\frac{h_{\sigma'}h_{\sigma''}}{h_\sigma}}\,\delta_{\sigma\tilde{\mu}}\delta_{\sigma'\tilde{\mu}'}\delta_{\sigma''\tilde{\mu}''}\delta_{\theta\varphi}. \tag{7-244b}$$

性质(1), (2), (3), (6)来源于酉群, 性质(4), (5), (7), (8)来源于置换群. 由此看到, 置换群和酉群 ISF 之间的关系式(7–229)式的发现, 大大地丰富了这两个群的 ISF 的对称性质.

例如对 $SU_4\supset SU_2\times SU_2\ ISF$, 由(7-239b)式和(7–240)式可得到以下对称性:

$$C^{[221][41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}=\epsilon_2 C^{[4^32^2][74][65]}_{[221][41][32],[222][42][42]}$$
$$=\epsilon_3'\left(\sqrt{\frac{3\times 3}{h_{[222]}(SU_4)}}\Big/\sqrt{\frac{4\times 2}{h_{[221]}(SU_4)}}\right)C^{[222][42][42]}_{[21][3][21],[21][3][21]}.$$

这里利用了等价性 (7–71) 式. 由此看到 5 个粒子系统的双粒子母分系数和 11 个粒子系统的 6 粒子母分系数及 6 个粒子系统的 3 粒子母分系数联系起来了. 这些对称性从置换群的角度是很难理解的.

$C^{[221][41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}$ 又是 $SU_6\supset SU_3\times SU_2\ ISF$, 于是又有以下对称性:

$$C^{[221][41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}=\epsilon_2 C^{[4^33^2][874][10,9]}_{[2^21][4^21][54],[2^3][4^22][64]}$$
$$=\epsilon_3\left(\sqrt{\frac{2h_{[33]}(SU_3)}{h_{[2^21]}(SU_6)}}\Big/\sqrt{\frac{2h_{[41]}(SU_3)}{h_{[221]}(SU_6)}}\right)C^{[2^21][4^21][54]}_{[2^21][431][43],[2][2][2]}.$$

例: (7-244b)式的应用.

Matveev 和 Sorba (1978) 用了相当多的篇幅所计算的 $SU_{12}\supset SU_4\times SU_3\ ISF$ 可由公式(7–244b)直接算出:

$$C^{[1^6][33][\tilde{33}]}_{[1^3][3][\tilde{3}],[1^3][3][\tilde{3}]}=\sqrt{h_{[3]}h_{[3]}/h_{[33]}}=\sqrt{1/5},$$
$$C^{[1^6][33][\tilde{33}]}_{[1^3][21][\tilde{21}],[1^3][21][\tilde{21}]}=\sqrt{h_{[21]}h_{[21]}/h_{[33]}}=\sqrt{4/5}.$$

4. 例子

下面我们用例子检验 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数和 m, n 无关这一结论.

例 1　单粒子母分系数.

5 个粒子以内, m, n 为任意值的 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 单粒子母分系数列在表 4.19. 现将其分表 13d 重新列在下面, 并加上了 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 母分系数 $C^{[\nu]ST}_{[\nu']S'T',[1]}$ 和 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 母分系数 $C^{[\nu](\lambda\mu)S}_{[\nu'](\lambda'\mu')S',[1]}$ 的表头. 可以看到, 表中给的 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数, 除位相因子外, 既和 Jahn、Wieringen (1951) 的 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 母分系数相同, 也与 So 和 Strottman(1979)的 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 母分系数相同, Kukulin 等指出, Jahn 的 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 母分系数的位相并没有用系统的方法确定下来. 我们在 § 4.19 中给出了确定 SU_{mn}

表 7.16　$SU_4\supset SU_2\times SU_2\ ISF\ C^{[\nu]ST}_{[\nu']S'T',[1]}$
$SU_6\supset SU_3\times SU_2\ ISF\ C^{[\nu](\lambda\mu)S}_{[\nu'](\lambda'\mu')S',[1]}$
$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n\ ISF\ C^{[\nu]\sigma\mu}_{[\nu']\sigma'\mu',[1]}$

$SU_4\supset SU_2\times SU_2$	$SU_6\supset SU_3\times SU_2$	$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$		$[\nu']=[211]$		
${}^{2S+1,2T+1}\Gamma$	$(\lambda\mu)S$	$[\sigma]$	$[\mu]$		$[\nu]$	
${}^{22}\Gamma$	$(12)1/2$	$[32]$	$[32]$	$[311]$	$[221]$	$[2111]$
${}^{2S'+1,2T'+1}\Gamma$	$(\lambda'\mu')S'$	$[\sigma']$	$[\mu']$			
${}^{33}\Gamma$	$(21)1$	$[31]$	$[31]$	$\sqrt{2/5}$	0	$\sqrt{3/5}$
${}^{31}\Gamma$	$(21)0$	$[31]$	$[22]$	$\sqrt{3/10}$	$\sqrt{1/2}$	$-\sqrt{1/5}$
${}^{13}\Gamma$	$(02)1$	$[22]$	$[31]$	$-\sqrt{3/10}$	$\sqrt{1/2}$	$\sqrt{1/5}$

$\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数位相的系统方法.

例 2　双粒子母分系数

让我们利用(7-238c)式求双粒子母分系数 $C^{[221],[41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}$. 该式中的 m 值可任意取.

我们取 $[221]m=\begin{matrix}1&2\\3&4\\5&\end{matrix}$. 于是

$$
\begin{aligned}
C^{[221],[41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}=&\left\langle\begin{matrix}1&2\\3&4\\5&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle^{-1}\\
&\times\left\{\left\langle\begin{matrix}1&2&3&4\\5&&&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle\left\langle\begin{matrix}1&2&4\\3&5&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle C^{[221][22]}_{[41][4],[32][31]}C^{[22][21]}_{[4][3],[31][21]}\right.\\
&+\left\langle\begin{matrix}1&2&3&5\\4&&&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle\left\langle\begin{matrix}1&2&4\\3&5&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle C^{[221][22]}_{[41][31],[32][31]}C^{[22][21]}_{[31][3],[31][21]}\\
&+\left\langle\begin{matrix}1&2&3&4\\5&&&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle\left\langle\begin{matrix}1&2&5\\3&4&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle C^{[221][22]}_{[41][4],[32][22]}C^{[22],[21]}_{[4][3],[22][21]}\\
&\left.+\left\langle\begin{matrix}1&2&3&5\\4&&&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle\left\langle\begin{matrix}1&2&5\\3&4&\end{matrix}\middle|[2]\right\rangle C^{[221][22]}_{[41][31],[32][22]}C^{[22][21]}_{[31][3],[22][21]}\right\}.
\end{aligned}
$$

利用(4-184)式和表 4.19 的单粒子母分系数, 得到

$$
C^{[221][41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}=2\left\{0+\sqrt{\frac{5}{8}}\sqrt{\frac{1}{4}}\left(-\sqrt{\frac{3}{8}}\right)\sqrt{\frac{1}{3}}+\sqrt{\frac{3}{8}}\sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{\frac{5}{8}}(1)+0\right\}=\sqrt{\frac{5}{16}}.
$$

除位相因子外, 它和 Elliott 等(1953)给出的 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 母分系数一致, 即

$$
C^{[221],[41][32]}_{[21][3][21],[2][2][2]}=C^{[32]^{44}\Gamma}_{[21]^{44}\Gamma,[2]^{31}\Gamma}=\sqrt{\frac{5}{16}}.
$$

由前面一般结论及以上具体例子看到 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数(或 isoscalar factor)和 m, n 无关, 只和 $\nu\sigma\mu\nu'\sigma'\mu'$ 等有关. 因此知道了任一 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数实际上就给出了无穷多个 $SU_{m'n'}\supset SU_{m'}\times SU_{n'}$ 母分系数, $m'=m+1, m+2, \cdots$, $n'=n+1, n+2, \cdots$. 这一简单的事实之所以被长期忽视, 是由于通常不用配分 $[\nu], [\sigma], [\mu]$, 而是用其它量子数作为 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 母分系数的指标, 因此把这一明显的事实掩盖起来了.

另一点要指出的是, 不是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 的所有的 ISF 都能从 $SU_{(m-1)n}\supset SU_{m-1}\times SU_n$ ISF 或 $SU_{m(n-1)}\supset SU_m\times SU_{n-1}$ ISF 得到, 例如 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF 中, $[\nu], [\nu']$ 的行数最多只能为四; $[\sigma], [\mu], [\sigma'], [\mu']$ 的行数最多只能为 2; 而 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ $[\nu], [\nu']$ 的行数可以到 6; $[\sigma], [\sigma']$ 的行数可以到 3. 显然, $[\nu], [\nu']$ 行数大于 2 的 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ ISF 不能从 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF 中得到.

最后举一个例子说明(7-238a)式的应用.

例　计算三粒子 OFP $A\equiv C^{[21^4][222][41]}_{[1^3][21][21],[1^3][21][21]}$.

在使用公式(7-238a)式时, 分量指标 m_1', m_2', m', m'' 和 m 可预先任意取定. 选得合适可使计算简化. 现在我们取 $m_1'=1, m_2'=2, m=5$. 利用(7-238a)式得到:

$$
\begin{aligned}
A=&\left(\left\langle\begin{matrix}[21^4]\\5\end{matrix}\middle|[1^3]\,[1^3]\right\rangle\sqrt{1/2}\right)^{-1}\sum_{m_1m_2m_1''m_2''}C^{[21^4]5}_{[222]m_1,[42]m_2}\\
&\times\left\langle\begin{matrix}[222]\\m_1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[21]&[21]\\1&m_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[42]\\m_2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[21]&[21]\\2&m_2''\end{matrix}\right\rangle C^{[1^3]}_{[21]m_1'',[21]m_2''}
\end{aligned}
$$

利用对称性(4-122)式和(4-180a)式及 S_3 群的 CG 系数, 得到

$$A=\left\langle\begin{matrix}[51]\\1\end{matrix}\middle|[3][3]\right\rangle^{-1}\sum_{m_1m_2m_2''}C^{[51]1}_{[33]m_1,[42]m_2}\left\langle\begin{matrix}[33]\\m_1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[21]&[21]\\2&m_2''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[42]\\m_2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[21]&[21]\\2&m_2''\end{matrix}\right\rangle.$$

由置换群表象变换系数表 4.18 知 m_1 和 m_2 的取值范围为 $m_1=3,\ 5;\ m_2=4,\ 7,\ 9$. 再利用文献 [12] 查得的 CG 系数 $C^{[51]1}_{[33]3,[42]7}=C^{[51]1}_{[33]5,[42]9}=\sqrt{1/5}$, 最后算得

$$C^{[\tilde{5}1],[222][41]}_{[1^3][21][21],[1^3][21][21]}=\frac{2}{3}.$$

施义晋等用上述方法计算了 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 双粒子和三粒子母分系数.

5. $SU_{4(2l+1)}\supset(SU_{2l+1}\supset SO_3)\times(SU_4\supset SU_2\times SU_2)$ ISF 和总母分系数

(7-185)式已经指出总母分系数和 ISF 的关系. 现在进一步考虑由 f_1 个粒子的全反对称态和另外 f_2 个粒子的全反对称态, 如何构成 $f_1+f_2=f$ 个粒子在 $SU_{4(2l+1)}$ 变换下具有确定对称性 $[\nu]$ 的波函数. 为简单起见, 略去附加指标 α, β (或者说把以下公式中的 L 和 ST 分别理解为 αL 和 βST). 令

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\\epsilon[\sigma]L[\mu]ST\end{matrix}\right\rangle \text{属于} \begin{matrix}SU_{4(2l+1)}\supset(SU_{2l+1}\supset SO_3)\times(SU_4\supset SU_2\times SU_2)\\ [\nu]\qquad\qquad [\sigma]\qquad\quad L\qquad\quad [\mu]\qquad S\qquad T\end{matrix} \text{表示} \tag{7-245}$$

$\epsilon=1,\ 2,\ \cdots(\sigma\mu\nu)$. 上式可利用 ISF 表为 f_1, f_2 个粒子的全反对称波函数乘积的线性组合:

$$\left|\begin{matrix}[\nu]_\tau\\\epsilon[\sigma]L,\ [\mu]ST\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\substack{\sigma'L'S'T'\\\sigma''L''S''T''}}C^{[\nu]_\tau,\epsilon[\sigma]L[\mu]ST}_{[1^{f_1}]\sigma'L'\tilde{\sigma}'S'T';[1^{f_2}]\sigma''L''\tilde{\sigma}''S''T''}$$

$$\times\left[\left|\begin{matrix}[1^{f_1}]\\ [\sigma']L'[\tilde{\sigma}']S'T'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[1^{f_2}]\\ [\sigma'']L''[\tilde{\sigma}'']S''T''\end{matrix}\right\rangle\right]^{LST}. \tag{7-246a}$$

由外积约化规则知: $\{[1^{f_1}][1^{f_2}][\nu]\}\leqslant 1$, 所以上式中指标 τ 是多余的, 以下略去. 上式中 C 为 $SU_{4(2l+1)}\supset(SU_{2l+1}\supset SO_3)\times(SU_4\supset SU_2\times SU_2)$ ISF, 它可因式分解为:

$$C^{[\nu],\epsilon[\sigma]L,[\mu]ST}_{[1^{f_1}]\sigma'L'\tilde{\sigma}'S'T',[1^{f_2}]\sigma''L''\tilde{\sigma}''S''T''}=\sum_{\theta\varphi}C^{[\nu],\epsilon[\sigma]_\theta[\mu]_\varphi}_{[1^{f_1}]\sigma'\tilde{\sigma}',[1^{f_2}]\sigma''\tilde{\sigma}''}C^{[\sigma]_\theta,L}_{[\sigma']L',[\sigma'']L''}C^{[\mu]_\varphi,ST}_{[\tilde{\sigma}']S'T',[\tilde{\sigma}'']S''T''}, \tag{7-247}$$

上式右边第一个因子为 $SU_{4(2l+1)}\supset SU_{2l+1}\times SU_4$ ISF.

令(3-307)式中 $A\to LST$, $\beta\to\epsilon\sigma\mu$, 得到(7-246a)式的逆展开式子:

$$\left[\left|\begin{matrix}[1^{f_1}]\\ [\sigma']L',\ [\tilde{\sigma}']S'T'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[1^{f_2}]\\ [\sigma'']L'',\ [\tilde{\sigma}'']S''T''\end{matrix}\right\rangle\right]^{LST}$$

$$=\sum_{\nu\epsilon\sigma\mu}C^{[\nu],\epsilon[\sigma]L[\mu]ST}_{[1^{f_1}]\sigma'L'\tilde{\sigma}'S'T',[1^{f_2}]\sigma''L''\tilde{\sigma}''S''T''}\left|\begin{matrix}[\nu]\\\epsilon[\sigma]L,\ [\mu]ST\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-246b}$$

上式给出 f_1 个粒子全反对称态和 f_2 个粒子全反对称态的乘积按 (f_1+f_2) 个粒子态的展开式. 注意, 上式右方对 $SU_{4(2l+1)}$ 的 $IR[\nu]$ 求和. 因此 $[\nu]$ 不仅限于全反对称表示 $[1^f]$. 以往常用记号 $(l^{f_1}[\sigma']L'S'T',\ l^{f_2}[\sigma'']L''S''T''|\}l^f[\sigma]LST)$ 代表总母分系数, 用记号 $|\}$ 强调它不是幺正的. 现在看到总母分系数实际上就是(7-247)式中 ISF 取 $[\nu]=[1^f]$, $[\mu]=[\tilde{\sigma}]$ 的一个特例

$$(l^{f_1}[\sigma']L'S'T',\ l^{f_2}[\sigma'']L''S''T''|\}l^f[\sigma]LST)=C^{[1^f],[\sigma]L[\tilde{\sigma}]ST}_{[1^{f_1}]\sigma'L'\tilde{\sigma}'S'T';[1^{f_2}]\sigma''L''\tilde{\sigma}''S''T''}, \tag{7-248}$$

而 $SU_{4(2l+1)}\supset(SU_{2l+1}\supset SO_3)\times(SU_4\supset SU_2\times SU_2)$ ISF (7-247)式是满足幺正性的.

§ 7.17 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ 母分系数*

§ 7.15 开头的一段话也适用于 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ ISF. 本节将证明 1. $S_{f_1+f_2} \supset S_{f_1} \otimes S_{f_2}$ 外积 ISF 就是 $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ 的 f_2 个粒子的母分系数. 2. $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ ISF 的值和 m, n 无关. 3. $SU_{m+n} \supset SU_m \otimes SU_n$ ISF 可表为置换群 ORC 和表象变换系数 $SNSTC$ 的函数.

1. $S_f \supset S_{f-1}$ 外积 ISF ($SU_f \supset SU_{f-1} \otimes U_1$ ISF)

本小节和 § 4.19 第 1 小节完全相平行,现在的问题是已知 S_{f-1} 群的 ORC, 如何求出 S_f 群的 ORC.

由于坐标置换群 S_f 的标准基就是坐标空间酉群 SU_f 的特殊的 Gelfand 基, S_f 群 ORC 就是 SU_f 群 CG 系数[见(7-91)式],因此 $S_f \supset S_{f-1}$ 外积 ISF 也就是 $SU_f \supset SU_{f-1} \otimes U_1$ ISF.

类似于表 4.19-1, 引入以下记号标志各个群的 IR 基

表 7.16-1

SU_f $S_{f_1}(\omega_1)$ $(\omega_1)=(\omega_1' f)$	SU_{f-1} $S_{f_1-1}(\omega_1')$	SU_f $S_{f_2}(\omega_2)$ $(\omega_2)=(\omega_2' f)$	SU_{f-1} $S_{f_2-1}(\omega_2')$	SU_f S_f	SU_{f-1} S_{f-1}
$\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ [\sigma'] m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert \begin{matrix}[\sigma'] \\ m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert \begin{matrix}[\mu] \\ m_2\omega_2\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[\mu] \\ [\mu'] m_2'\omega_2'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert \begin{matrix}[\mu'] \\ m_2'\omega_2'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert \begin{matrix}[\nu] \\ m\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[\nu] \\ [\nu'] m'\end{matrix}\right\rangle$	$\left\lvert \begin{matrix}[\nu'] \\ m'\end{matrix}\right\rangle$

类似于(4-186)式有

$$[\sigma] m_1\omega_1 = [\sigma][\sigma'] m_1'\omega_1', \quad [\mu] m_2\omega_2 = [\mu][\mu'] m_2'\omega_2', \quad [\nu] m = [\nu][\nu'] m'. \tag{7-249}$$

和内积情形不同的一点是这里要区分最后一个粒子编号 f 在 (ω_1) 内或是在 (ω_2) 内两种情形. 如果 f_1 在 (ω_1) 内, 则广义杨盘 $\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle$ 中去掉 f 后, 变到 $\left\lvert \begin{matrix}[\sigma'] \\ m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle$, 否则仍然为 $\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle$. 例如 $f_1=f_2=3$, $f=6$

$$\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[21] \\ m_1=1,\ \omega=(135)\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 3 \\ \hline 5 \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle \xrightarrow{\text{去掉 6}} \left\lvert \begin{matrix}[\sigma'] \\ m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle, \tag{7-250a}$$

$$\begin{aligned}\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ m_1\omega_1\end{matrix}\right\rangle &= \left\lvert \begin{matrix}[21] \\ m_1=2,\ (\omega)=(256)\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{array}{|c|c|}\hline 2 & 6 \\ \hline 5 \\ \cline{1-1}\end{array}\right\rangle \xrightarrow{\text{去掉 6}} \left\lvert \begin{array}{|c|}\hline 2 \\ \hline 5 \\ \hline\end{array}\right\rangle \\ &= \left\lvert \begin{matrix}[\sigma'] \\ m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle = \left\lvert \begin{matrix}[11] \\ m_1'=1,\ \omega_1'=(25)\end{matrix}\right\rangle.\end{aligned} \tag{7-250b}$$

对 $\left\lvert \begin{matrix}[\mu] \\ m_2\omega_2\end{matrix}\right\rangle$ 有类似的式子.

首先用 S_{f-1} 群 ORC(即 SU_{f-1} 群 CG 系数) $C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma' m_1'\omega_1',\mu' m_2'\omega_2'}$ 将 $S_{f_1}(\omega_1)$ 和 $S_{f_2}(\omega_2)$ 标准基(即 SU_f Gelfand 基)线性组合成 S_{f-1} 群标准基(即 SU_{f-1} 群 Gelfand 基) $[\nu'] m'$:

$$\lvert (\sigma'\mu')\beta' \rangle \equiv \left[\left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ [\sigma']\end{matrix}\right\rangle \left\lvert \begin{matrix}[\mu] \\ [\mu']\end{matrix}\right\rangle \right]^{[\nu']\beta'}_{m'} = \sum_{m_1'\omega_1' m_2'\omega_2'} C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma' m_1'\omega_1',\mu' m_2'\omega_2'} \left\lvert \begin{matrix}[\sigma] \\ [\sigma'] m_1'\omega_1'\end{matrix}\right\rangle \left\lvert \begin{matrix}[\mu] \\ [\mu'] m_2'\omega_2'\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-251}$$

然后再用 $S_f \supset S_{f-1}$ 外积 ISF[1] (即 $SU_f \supset SU_{f-1}$ ISF) $C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$ 将(7-251)式线性组合成 S_f 群的标准基(即 SU_f Gelfand 基):

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\beta \\ m\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[\nu]\beta \\ [\nu']m'\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\sigma'\mu'\beta'} C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}\left[\left|\begin{matrix}[\sigma] \\ [\sigma']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu] \\ [\mu']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\beta'}_{m'}. \tag{7-252}$$

上式形式上和(4-188)式一样,其逆展开式同(4-190)式. 将(7-251)(7-252)式和(4-140)式比较,并注意 $\sum\limits_{\sigma' m_1' \omega_1'}$ 等价于 $\sum\limits_{m_1 \omega_1}$, $\sum\limits_{\mu' m_2' \omega_2'}$ 等价于 $\sum\limits_{m_2 \omega_2}$, 可得到 S_f 群 ORC (SU_f 群 CG 系数)的因式分解公式:

$$C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2,\omega}=\sum_{\beta'} C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'} C^{[\nu']\beta' m'}_{\sigma' m_1',\mu' m_2',\omega'}. \tag{7-253}$$

这里$(\omega)=(\omega_1, \omega_2)$, $(\omega')=(\omega_1', \omega_2')$. 式中的量子数要满足关系式(7-249)式. 上式左边是 SU_f 群 CG 系数, 右边最后一个因子是 SU_{f-1} 群 CG 系数, 因此 $S_f \supset S_{f-1}$ 外积 ISF 就是 $SU_f \supset SU_{f-1}$ ISF. 由上式得

$$C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta}_{\sigma\sigma',\mu\mu''}=\sum_{m_1' m_2' \omega'} C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2,\omega} C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma' m_1',\mu' m_2',\omega'}. \tag{7-254a}$$

当多重性指标 β' 为多余时,由(7-253)式得

$$C^{[\nu]\beta,[\nu']}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}=C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2,\omega}/C^{[\nu'],m'}_{\sigma' m_1',\mu' m_2',\omega'}. \tag{7-254b}$$

例如由(7-254b)式以及文献[12] S_6 群 ORC 和表 4.17-5d S_5 群 ORC 可算得

$$\begin{aligned}
C^{[321]\alpha,[311]}_{[21][2],[21][21]}&=\left\langle \begin{array}{lll}\scriptstyle(\alpha)&&\\ 1&3&5\\ 2&6&\\ 4&&\end{array}\middle|\begin{array}{ll}1&3\\ 6&\end{array},\ \begin{array}{ll}2&4\\ 5&\end{array}\right\rangle\Big/\left\langle \begin{array}{lll}1&3&5\\ 2&&\\ 4&&\end{array}\middle|\begin{array}{ll}1&3\end{array},\ \begin{array}{ll}2&4\\ 5&\end{array}\right\rangle\\
&=\sqrt{\frac{48}{3840}}\Big/\sqrt{\frac{48}{320}}=\sqrt{\frac{1}{12}},\\
C^{[321]\beta,[32]}_{[21][21],[21][2]}&=\left\langle \begin{array}{lll}\scriptstyle(\beta)&&\\ 1&2&4\\ 3&5&\\ 6&&\end{array}\middle|\begin{array}{ll}1&2\\ 3&\end{array},\ \begin{array}{ll}4&5\\ 6&\end{array}\right\rangle\Big/\left\langle \begin{array}{lll}1&2&4\\ 3&5&\end{array}\middle|\begin{array}{ll}1&2\\ 3&\end{array},\ \begin{array}{ll}4&5\end{array}\right\rangle\\
&=-\sqrt{\frac{48}{768}}\Big/\sqrt{\frac{48}{320}}=-\sqrt{\frac{5}{12}}.
\end{aligned} \tag{7-255}$$

$S_f \supset S_{f-1}$ 外积 ISF 仍满足本征方法(4-192)式,只需将其中矩阵元改为:

$$\begin{aligned}
&\langle(\bar{\sigma}'\bar{\mu}')\bar{\beta}'|(in)|(\sigma'\mu')\beta'\rangle\\
&=\sum_{\bar{m}_1'\bar{m}_2'\bar{\omega}'m_1'm_2'\omega'} C^{[\nu']\bar{\beta}',\bar{m}'}_{\bar{\sigma}'\bar{m}_1',\bar{\mu}'\bar{m}_2',\bar{\omega}'} C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma' m_1',\mu' m_2',\omega'}\langle\bar{m}_1\bar{m}_2\bar{\omega}|(in)|m_1m_2\omega\rangle.
\end{aligned} \tag{7-256a}$$

式中

$$\langle\bar{m}_1\bar{m}_2\bar{\omega}|(in)|m_1m_2\omega\rangle=\langle\psi^{[\sigma]}_{\bar{m}_1}(\bar{\omega}_1)\psi^{[\mu]}_{\bar{m}_2}(\bar{\omega}_2)|(in)|\psi^{[\sigma]}_{m_1}(\omega_1)\psi^{[\mu]}_{m_2}(\omega_2)\rangle. \tag{7-256b}$$

上式可按(4-147)式计算. (7-256a)式左边仍为对称矩阵.

(4-192)式和(4-143)式相比, 前者是一低阶方程,后者是一高阶方程. 当 $N=h_\sigma h_\mu\begin{pmatrix}f\\ f_1\end{pmatrix}$ 较大时,我们可把 S_f 群 ORC 的计算化为计算 $S_f \supset S_{f-1}$, $S_{f-1} \supset S_{f-2}$, …等的外积 ISF, 这样就避免了解高阶方程(4-143)式的困难.

$SU_f \supset SU_{f-1}$ 的 ISF $C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$ 的值和 f 的具体数值无关, 只要求 f 大于杨图 $[\nu]$ 的

1) 我们对置换群内、外积 ISF 用相同的记号,在具体问题中,它们是容易区分的. 对内积 ISF, 杨图$[\sigma]$, $[\mu]$, $[\nu]$ 具有相同的方格数,而对外积 ISF, 杨图$[\sigma]$和$[\mu]$的方块数之和等于$[\nu]$的方块数.

行数.

例　对 S_4 群求 $[\nu']=[21]$, $[\sigma]=[21]$, $[\mu]=1$ 时的 $S_4\supset S_3$ 外积 $ISF\ C^{[\nu];[\nu']}_{\sigma\sigma';\mu\mu'}$.

步骤 1. 根据分支律(7-250)式知 $[\sigma']=[21]$, $[2]$, $[11]$, 相应的 $[\mu']=[0]$, $[1]$, $[1]$. 由于 $S_f\supset S_{f-1}$ 外积 ISF 的值和 (7-252) 式中的量子数 m' 无关, 这里就取 $m'=1$ (第一分量). 由(7-251)式利用表 4.17-2 S_3 群 ORC, 可构成以下三个基:

$$
\begin{aligned}
\varphi_1&=\left[\left|\begin{matrix}[21]\\ [21]\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[1]\\ [0]\end{matrix}\right\rangle\right]_1^{[21]}=\left|\begin{smallmatrix}1&2\\3&\end{smallmatrix},\ \boxed{4}\right\rangle=\psi_1,\\
\varphi_2&=\left[\left|\begin{matrix}[21]\\ [2]\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[1]\\ [1]\end{matrix}\right\rangle\right]_1^{[21]}=\sqrt{\frac{1}{6}}\left(2\left|\begin{smallmatrix}1&2\\4&\end{smallmatrix},\ \boxed{3}\right\rangle-\left|\begin{smallmatrix}1&3\\4&\end{smallmatrix},\ \boxed{2}\right\rangle\right.\\
&\qquad\left.-\left|\begin{smallmatrix}2&3\\4&\end{smallmatrix},\ \boxed{1}\right\rangle\right)=\sqrt{\frac{2}{3}}\,\psi_2-\sqrt{\frac{1}{3}}\,\psi_3,\\
\varphi_3&=\left[\left|\begin{matrix}[21]\\ [11]\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[1]\\ [1]\end{matrix}\right\rangle\right]_1^{[21]}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{smallmatrix}1&4\\3&\end{smallmatrix},\ \boxed{2}\right\rangle+\left|\begin{smallmatrix}2&4\\3&\end{smallmatrix},\ \boxed{1}\right\rangle\right)=\psi_4,
\end{aligned}
\tag{7-257}
$$

式中 ψ_1, …, ψ_4 为(4-149b)式所定义的基. 由(4-149c)式得到算符 $C'(4)=C(4)-C(3)$ 在 ψ_1, …, ψ_4 基上的表示矩阵

$$
C'(4)=C^{(+)}(4)-C^{(+)}(3)=\begin{pmatrix}0&1&-\sqrt{\frac{1}{2}}&\sqrt{\frac{3}{2}}\\1&-1&0&0\\-\sqrt{\frac{1}{2}}&0&-1&0\\\sqrt{\frac{3}{2}}&0&0&1\end{pmatrix}.\tag{7-258}
$$

由(7-257)式、(7-258)式得到 $C'(4)$ 在 φ_1, φ_2, φ_3 基上的表示矩阵

$$
M=\begin{pmatrix}0&\sqrt{\frac{3}{2}}&\sqrt{\frac{3}{2}}\\\sqrt{\frac{3}{2}}&-1&0\\\sqrt{\frac{3}{2}}&0&1\end{pmatrix}\tag{7-259}
$$

根据(4-192)式, 将 M 对角化即可求出 $S_4\supset S_3$ 外积 ISF. 矩阵 M 有三个本征值 $\nu=2$, 0, -2, 对应于 $[\nu]=[31]$, $[22]$, $[211]$. 三个本征矢量给出 $S_4\supset S_3$ 外积 ISF, 列在表 7.17-2, 除位相外它和 Haacke 等给出的 $SU_4\supset SU_3$ ISF 一致.

表 7.17-2　$S_4\supset S_3$ 外积 ISF 和 $SU_n\supset SU_{n-1}$ ISF $C^{[\nu];[\nu']}_{\sigma\sigma';\mu\mu'}$

$[\nu']$ / $[\nu]$ / $\sigma\sigma'$, $\mu\mu'$	[21]		
	[31]	[22]	[211]
[21][21], [1][0]	$\sqrt{3/8}$	1/2	$\sqrt{3/8}$
[21][11], [1][1]	3/4	$\sqrt{3/8}$	$-1/4$
[21][2], [1][1]	1/4	$-\sqrt{3/8}$	$-3/4$

2. $S_f \supset S_{f_{12}} \otimes S_{f_{34}}$ 外积 IFS ($SU_f \supset SU_{f_{12}} \otimes SU_{f_{34}} ISF$)

本小节和§4.19第5小节相平行.

粒子数仍用(7-212a)式表示,将数 1, 2, $\cdots f$ 分成四个正序列(ω_1'), (ω_2'), (ω_1''), (ω_2'')

$$(\omega_1') = (a_1, \cdots, a_{f_1}), \quad (\omega_2') = (a_{f_1+1}, \cdots, a_{f_{12}}), \tag{7-260}$$

$$(\omega_1'') = (a_{f_{12}+1}, \cdots, a_{f_{123}}), \quad (\omega_2'') = (a_{f_{123}+1}, \cdots, a_f), \tag{7-261}$$

$$(\omega') = (\omega_1', \omega_2'), \ (\omega'') = (\omega_1'', \omega_2''), \ (\omega_1) = (\omega_1', \omega_1''), \ (\omega_2) = (\omega_2', \omega_2''),$$

其中(ω')为从$(1, 2, \cdots, f_{12})$中取的正序列, (ω'')为从$(f_{12}+1, \cdots, f)$中取的正序列[见(4-128)式]. 指标$1, 2, \cdots, f_{12}$标志的单粒子态构成$SU_{f_{12}}$的基, 指标$f_{12}+1, \cdots, f$标志的单粒子态构成$SU_{f_{34}}$的基. 用以下括号代表九个配分及其所属的酉群、对应的量子数和粒子编码

$$\begin{pmatrix} \sigma' & \mu' & \nu'_{\beta'} \\ \sigma'' & \mu'' & \nu''_{\beta''} \\ \sigma_\theta & \mu_\varphi & \nu_{\tau,\beta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} SU_{f_{13}} & SU_{f_{24}} & SU_{f_{12}} \\ SU_{f_{34}} & SU_{f_{34}} & SU_{f_{34}} \\ SU_f & SU_f & SU_f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 & f_2 & f_{12} \\ f_3 & f_4 & f_{34} \\ f_{13} & f_{24} & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1' & \omega_2' & \omega' \\ \omega_1'' & \omega_2'' & \omega'' \\ \omega_1 & \omega_2 & \omega \end{pmatrix} \tag{7-262}$$

$$\beta' = 1, 2, \cdots \{\sigma'\mu'\nu'\}, \quad \beta'' = 1, 2, \cdots, \{\sigma''\mu''\nu''\}, \quad \beta = 1, 2, \cdots \{\sigma\mu\nu\},$$

$$\theta = 1, 2, \cdots \{\sigma'\sigma''\sigma\}, \quad \varphi = 1, 2, \cdots, \{\mu'\mu''\mu\}, \quad \tau = 1, 2, \cdots, \{\nu'\nu''\nu\}.$$

例如$[\nu'']$标志$SU_{f_{34}}$群的IR, 粒子数为f_{34}, 不可约基为$|Y_{m''}^{[\nu'']}(\omega'')\rangle \equiv \left|\begin{matrix}[\nu''] \\ m''\omega''\end{matrix}\right\rangle$.

引入以下三种置换群非标准基(见(4-165)式)

$$\left|\begin{matrix}[\sigma] \\ \theta[\sigma']m_1'[\sigma'']m_1''\end{matrix}\right\rangle, \quad \left|\begin{matrix}[\mu] \\ \varphi[\mu']m_2'[\mu'']m_2''\end{matrix}\right\rangle, \quad \left|\begin{matrix}[\nu] \\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-263}$$

$$S_{f_{13}} \supset S_{f_1} \otimes S_{f_3} \qquad S_{f_{24}} \supset S_{f_2} \otimes S_{f_4} \qquad S_f \supset S_{f_{12}} \otimes S_{f_{34}}.$$

它们同时又都是$SU_f \supset SU_{f_{12}} \otimes SU_{f_{34}}$分类基. 例如$\left| [42]; \begin{matrix} 1 & 2 & 4 \\ 3 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 5 & 6 \end{matrix} \right\rangle$为$SU_6 \supset SU_4 \otimes SU_2$分类基. 它属于$\begin{matrix} SU_6 \supset SU_4 \otimes SU_2 \\ [42] \quad [31] \quad [2] \end{matrix}$表示, (1, 2, 3, 4)和(5, 6)标志的单粒子态分别构成SU_4和SU_2的基本表示.

将(7-263)式中前两种分类基组合成第三种分类基可分两步走(比较(4-198)式～(4-200)式的推导过程).

(a) 用$S_{f_{12}}$的ORC(即$SU_{f_{12}}$群CG系数)$C^{[\nu']\beta', m'}_{\sigma' m_1', \mu' m_2', \omega'}$和$S_{f_{34}}$的$ORC$(即$SU_{f_{34}}$群$CG$系数)$C^{[\nu'']\beta'', m''}_{\sigma'' m_1'', \mu'' m_2'', \omega''}$将(7-263)式前两种基耦合成$S_{f_{12}}$的标准基(即$SU_{f_{12}}$ Gelfand 基)$[\nu']m'$和$S_{f_{34}}$的标准基(即$SU_{f_{34}}$的 Gelfand 基)$[\nu'']m''$:

$$|(\sigma'\sigma'')_\theta(\mu'\mu'')_\varphi\beta\beta'\rangle \equiv \left[\left|\begin{matrix}[\sigma] \\ \theta[\sigma'][\sigma'']\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\mu] \\ \varphi[\mu'][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\mu[\nu'']\beta\beta'}_{m'm''}$$

$$= \sum_{m_1'm_2'\omega'm_1''m_2''\omega''} C^{[\nu']\beta', m'}_{\sigma' m_1', \mu' m_2', \omega'} C^{[\nu'']\beta'', m''}_{\sigma'' m_1'', \mu'' m_2'', \omega''} \left|\begin{matrix}[\sigma] \\ \theta\sigma' m_1'\omega_1', \ \sigma'' m_1''\omega_1''\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[\mu] \\ \varphi\mu' m_2'\omega_2', \ \mu'' m_2''\omega_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-264}$$

(b) 用$S_f \supset S_{f_{12}} \otimes S_{f_{34}}$外积$ISF$(即$SU_f \supset SU_{f_{12}} \otimes SU_{f_{34}} ISF$)将(7-264)式组合成$S_f \supset S_{f_{12}} \otimes S_{f_{34}}$基(即$SU_f \supset SU_{f_{12}} \otimes SU_{f_{34}}$基)

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\beta\\ \tau[\nu']m'[\nu'']m''\end{matrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{\substack{\theta\sigma'\sigma''\beta'\\ \varphi\mu'\mu''\beta''}} C^{[\nu]\beta,\tau[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{[\sigma]\theta\sigma'\sigma'',[\mu]\varphi\mu'\mu''}\left[\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ \theta[\sigma'][\sigma'']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ \varphi[\mu'][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{m'm''}. \qquad (7\text{-}265)$$

上式形式上和(4-200)式一致．其逆展开式同(4-201)式．

3．$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 和 $S_f\supset S_{f_{12}}\otimes S_{f_{34}}$ 外积 ISF

前一节我们仅从坐标空间置换群和酉群考虑问题，现在我们从坐标空间置换群和态空间酉群(记为 $\mathscr{U}$)来考虑问题．(7-262)式中 9 个配分除了该式所指明的含义外，还代表 $\mathscr{U}$ 群的 IR，即

$$\begin{pmatrix}\sigma' & \mu' & \nu'_{\beta'}\\ \sigma'' & \mu'' & \nu''_{\beta''}\\ \sigma_\theta & \mu_\varphi & \nu_{\tau,\beta}\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}S\mathscr{U}_m & S\mathscr{U}_n & S\mathscr{U}_{m+n}\\ S\mathscr{U}_m & S\mathscr{U}_n & S\mathscr{U}_{m+n}\\ S\mathscr{U}_m & S\mathscr{U}_n & S\mathscr{U}_{m+n}\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}f_1 & f_2 & f_{12}\\ f_3 & f_4 & f_{34}\\ f_{13} & f_{24} & f\end{pmatrix}. \qquad (7\text{-}266)$$

令

$$\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'W_1'\mu'W_2'\end{matrix}\right\rangle,\quad \left|\begin{matrix}[\nu'']\\ \beta''\sigma''W_1'',\ \mu''W_2''\end{matrix}\right\rangle,\quad \left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\sigma W_1\mu W_2\end{matrix}\right\rangle, \qquad (7\text{-}267)$$

分别为粒子 $(1,\ 2,\ \cdots,\ f_{12})$，$(f_{12}+1,\ \cdots,\ f)$ 和 $(1,\ 2,\ \cdots,\ f)$ 的 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 分类基．$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 的定义式同(7-224)式．(7-225)式～(7-227)式仍然有效．

由 (7-224) 式和 (7-267) 式可知 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 母分系数的意义．它代表在 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 分类基中，从 $\{m\}$ 组态分出 $S\mathscr{U}_m$ 对称性为 $[\sigma'']$ 的 f_3 个粒子，从 $\{n\}$ 组态中分出 $S\mathscr{U}_n$ 对称性为 $[\mu'']$ 的 f_4 个粒子，然后这 f_3+f_4 个粒子组合成具有 $S\mathscr{U}_{m+n}$ 对称性 $[\nu'']$ 的几率振幅．

类似地可以证明 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 就等于 $S_f\supset S_{f_{12}}\otimes S_{f_{34}}$ 外积 ISF (即 $SU_f\supset SU_{f_{12}}\otimes SU_{f_{34}}$ ISF)．

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=C^{[\nu]\beta,\tau[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{\sigma\theta\sigma'\sigma'',\mu\varphi\mu'\mu''}. \qquad (7\text{-}268)$$

$$S\mathscr{U}_{m+n}\subset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n\ ISF \qquad S_f\supset S_{f_{12}}\otimes S_{f_{34}}\ \text{外积}\ ISF$$

因此 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 的值不明显依赖于 m 和 n．前面关于 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF 的评论也适用于 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF．

$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 的一个特例是 $S\mathscr{U}_n\supset S\mathscr{U}_{n-1}\otimes\mathscr{U}_1$ ISF，它又缩写为 $S\mathscr{U}_n\supset S\mathscr{U}_{n-1}$ ISF，或称为 $S\mathscr{U}_{n-1}$ 单态因子(singlet factor)，记为 $S\mathscr{U}_{n-1}SF$．这时 $\mathscr{U}_1$ 的不可约表示 $[\mu']$，$[\mu'']$ 和 $[\mu]$ 必须是全对称的，即 $[\mu']=[f_2]$，$[\mu'']=[f_4]$，$[\mu]=[f_{24}]$；而附加指标 φ，β，β' 和 β'' 成为多余的．(7-268)式变成

$$C^{[\nu]\tau,[\sigma]\theta[f_{24}]}_{[\nu'][\sigma'][f_2],[\nu''][\sigma''][f_4]}=C^{[\nu],\tau[\nu'][\nu'']}_{[\sigma]\theta[\sigma'][\sigma''],[f_{24}][f_2][f_4]}. \qquad (7\text{-}269)$$

$$S\mathscr{U}_{n-1}SF \qquad S_f\supset S_{f_{12}}\otimes S_{f_{34}}\ \text{外积}\ ISF$$

4．$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 的计算

类似于 (7-236b) 式的推导，可以得到 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 用 S_f，$S_{f_{12}}$，$S_{f_{34}}$ 群 CGC，和 S_f，$S_{f_{12}}$，$S_{f_{34}}$ 群表象变换系数表示出来的公式：

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=\sum_{mm_1m_2\omega m_1''m_2''}^{\text{固定}\ m'm''} C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2,\omega}C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2',\omega'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2'',\omega''}$$

$$\times\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu],\ \tau\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\sigma],\ \theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\mu],\ \varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \qquad (7\text{-}270a)$$

注意, $(\omega)=(\omega_1,\ \omega_2)$, 由(7-261)式知道, 对 ω 的求和隐含了对 ω' 和 ω'' 的求和.

类似于(7-236c)式和(7-238a)式的简化公式为:

(1) 当 $\tau=\{\nu'\nu''\nu\}=1$ 时

$$C^{[\nu],\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\ \begin{matrix}\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle^{-1}\sum_{m_1m_2\omega m_1'm_2'}^{\text{固定 } m_1'm_2'}C^{[\nu]\beta,\ m}_{\sigma m_1,\ \mu m_2,\ \omega}$$

$$\times C^{[\nu']\beta',m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2',\omega'}C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2'',\omega''}\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma],\ \begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu],\ \begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-270b}$$

(2) 当 $\tau=\{\nu'\nu''\nu\}=1,\ \beta'=\{\sigma'\mu'\nu'\}=1$ 时

$$C^{[\nu],\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''}=\left(\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\middle|[\nu],\ \begin{matrix}\nu'\nu''\\ m'm''\end{matrix}\right\rangle C^{[\nu'],m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2',\omega'}\right)^{-1}\sum_{m_1m_2m_1'm_2'\omega''}^{\text{固定 } m_1'm_2'\omega'}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\ \mu m_2,\ \omega}$$

$$\times C^{[\nu'']\beta'',m''}_{\sigma''m_1'',\mu''m_2'',\omega''}\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_1\end{matrix}\middle|[\sigma]\ \begin{matrix}\theta\sigma'\sigma''\\ m_1'm_1''\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_2\end{matrix}\middle|[\mu],\ \begin{matrix}\varphi\mu'\mu''\\ m_2'm_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{7-270c}$$

对双粒子母分系数, (7-270c)式可进一步简化.

(a) $[\mu'']=[0]$

$$C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{[\nu']\sigma'\mu',[\nu''][\sigma''][0]}$$
$$=\delta_{\nu''\sigma''}\left(\langle[\nu]m\,|\,[\nu'']\rangle C^{[\nu']m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2',\omega'}\right)^{-1}\sum_{m_1}^{\text{固定 } m_1'}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\ \mu m_2,\ \omega}\langle[\sigma]m_1\,|\,[\sigma'']\rangle. \tag{7-271a}$$

对 $[\sigma'']=[0]$ 有相似的式子.

(b) $[\sigma'']=[\mu'']=[1]$

$$C^{[\nu]\beta[\sigma][\mu]}_{[\nu']\sigma'\mu',[\nu''][1][1]}=\left(\langle[\nu]m\,|\,[\nu'']\rangle C^{[\nu']m'}_{\sigma'm_1',\mu'm_2',\omega'}\right)^{-1}\sum_{m_1m_2\omega''}^{\text{固定 } m_1'm_2'\omega'}C^{[\nu]\beta,m}_{\sigma m_1,\mu m_2,\omega}C^{[\nu'']}_{[1],[1],\omega''}. \tag{7-271b}$$

例 1　单粒子母分系数

对单粒子母分系数, 展开式(7-224b)式可简写成

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\sigma\mu\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\beta'\sigma'}C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{\nu'\beta'\sigma'\mu,[1][1][0]}\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma'\mu\end{matrix}\right\rangle|\psi(f)\rangle+\sum_{\beta'\mu'}C^{[\nu],\beta\sigma\mu}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',[1][0][1]}\left|\begin{matrix}[\nu']\\ \beta'\sigma\mu'\end{matrix}\right\rangle|\varphi(f)\rangle. \tag{7-272}$$

这里 $\psi(f)$ 属于 $\{m\}$ 组态, $\varphi(f)$ 属于 $\{n\}$ 组态.

由 S_5 群 ORC(表 4.17), S_6 群 ORC 表[13] 及(7-254b)式可得:

$$\left|\begin{matrix}[321]\\ \alpha[21]\,[21]\end{matrix}\right\rangle=\sqrt{\frac{9}{20}}\left(\left|\begin{matrix}[32]\\ [2]\,[21]\end{matrix}\right\rangle|\psi(6)\rangle+\left|\begin{matrix}[32]\\ [21]\,[2]\end{matrix}\right\rangle|\varphi(6)\rangle\right)$$
$$+\sqrt{\frac{1}{20}}\left(\left|\begin{matrix}[32]\\ [11]\,[21]\end{matrix}\right\rangle|\psi(6)\rangle+\left|\begin{matrix}[32]\\ [21]\,[11]\end{matrix}\right\rangle|\varphi(6)\rangle\right);$$

$$\left|\begin{matrix}[321]\\ \beta[21]\,[21]\end{matrix}\right\rangle=\frac{1}{2}\left(-\left|\begin{matrix}[32]\\ [2]\,[21]\end{matrix}\right\rangle|\psi(6)\rangle+\left|\begin{matrix}[32]\\ [21]\,[2]\end{matrix}\right\rangle|\varphi(6)\rangle\right.$$
$$\left.+\left|\begin{matrix}[32]\\ [11]\,[21]\end{matrix}\right\rangle|\psi(6)\rangle-\left|\begin{matrix}[32]\\ [21]\,[11]\end{matrix}\right\rangle|\psi(6)\rangle\right).$$

例 2　双粒子母分系数

由(7-271)式, (4-184)式及 S_6 群和 S_4 群 ORC, 可算得

$$C^{[321],\alpha[21][21]}_{[31][21][1],[2][0][2]}=\left(\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&5&\\6&&\end{smallmatrix}\middle|[2]\right\rangle\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&&\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}1&2\\3&\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}4\end{smallmatrix}\right\rangle\right)^{-1}$$

$$\times\left[(1+(pq))\left(\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&5&\\6&&\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}1&2\\3&\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}4&p\\q&\end{smallmatrix}\right\rangle\left\langle\begin{smallmatrix}4&p\\q&\end{smallmatrix}\middle|[2]\right\rangle\right)^{(\alpha)}\right]_{p=5,\ q=6}=\sqrt{\frac{3}{10}}.$$

$$C^{[321],\alpha[21][21]}_{[31][11][2],[11][1][1]}=\left(\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&5&\\6&&\end{smallmatrix}\middle|[11]\right\rangle\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&&\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}3\\4\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}1&2\end{smallmatrix}\right\rangle\right)^{-1}$$

$$\times\left[(1+(pq))\left(\left\langle\begin{smallmatrix}1&2&4\\3&5&\\6&&\end{smallmatrix}\middle|\begin{smallmatrix}3&p\\4&\end{smallmatrix}\ \begin{smallmatrix}1&2\\q&\end{smallmatrix}\right\rangle C^{[11]}_{[1]p,[1]q}\right)^{(\alpha)}\right]_{p=5,\ q=6}=\sqrt{\frac{4}{15}}.$$

式中(pq)为置换算符．对右边括号内进行置换运算后，再令$p=5$，$q=6$．

表 7.17 列出了态$|[321],\alpha[21][21]\rangle$而母态为$|[31]\rangle$时的双粒子母分系数

表 7.17　$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 双粒子母分系数 $C^{[321],\alpha[21][21]}_{[31]\sigma'\mu',[\nu'']\sigma''\mu''}$

$\sigma'\mu',\sigma''\mu''$ ＼ $[\nu],\alpha[\sigma][\mu]$	$[\nu']=[31]$，$[\nu'']=[2]$				
	[21][1], [0][2]	[1][21], [2][0]	[2][1], [1][1]	[11][2], [1][1]	[2][2], [1][1]
[321], α[21][21]	$\sqrt{3/10}$	$\sqrt{3/10}$	$-\sqrt{2/10}$	$-\sqrt{2/10}$	0
	$[\nu']=[31]$，$[\nu'']=[11]$				
	[21][1], [0][11]	[1][21], [11][0]	[2][11], [1][1]	[11][2], [1][1]	[2][2], [1][1]
	$\sqrt{1/30}$	$\sqrt{1/30}$	$-\sqrt{8/30}$	$\sqrt{8/30}$	$-\sqrt{12/30}$

注意　表中两行系数满足归一性(7-154a)式，但它们并不互相正交．正交性(7-154a)式是对固定$[\nu']$，$[\nu'']$，$[\sigma]$和$[\mu]$而言的．而这里第一行属于$[\nu'']=[2]$，第二行属于$[\nu'']=[11]$．

$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 母分系数的对称性．

$S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ 母分系数仍满足对称性(7-239)式和(7-240)式(但(7-240)式中$h_\nu(SU_{mn})$和$h_{\nu'}(SU_{mn})$应改为$h_\nu(SU_{m+n})$和$h_{\nu'}(SU_{m+n})$)．

例如，对 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF，利用对称性(7-239b)式和(7-240)式得到

$$C^{[321][21][21]}_{[31][11][2],[11][1][1]}=\epsilon_2 C^{[4321][32][32]}_{[332][22][31],[11][1][1]}$$

$$=\epsilon_3\left(\sqrt{\frac{1\times 3}{h_{[332]}(SU_4)}}\Big/\sqrt{\frac{2\times 2}{h_{[321]}(SU_4)}}\right)C^{[332][22][31]}_{[321][21][21],[11][1][1]}.$$

如果把第一个系数看作 $SU_5\supset SU_3\times SU_2$ ISF，则有

$$C^{[321][21][21]}_{[31][11][2],[11][1][1]}=\epsilon_2 C^{[4^2321][432][32]}_{[3^22][32^2][31],[1^2][11][1]}$$

$$=\epsilon_3\left(\sqrt{\frac{3\times 3}{h_{[3^22]}(SU_5)}}\Big/\sqrt{\frac{2\times 8}{h_{[321]}(SU_5)}}\right)C^{[3^22][322][31]}_{[3321][321][21],[11][1][1]}.$$

此外 $S\mathscr{U}_{m+n}\supset S\mathscr{U}_m\otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 还具有以下对称性：

(1)　由(7-269a)式可知，该 ISF 在以下的指标交换下不变：

$$\mu'\leftrightarrow\sigma'',\quad \nu'\leftrightarrow\sigma,\quad \nu''\leftrightarrow\mu,\quad \beta\leftrightarrow\tau,\quad \beta'\leftrightarrow\theta,\quad \beta''\leftrightarrow\varphi.\tag{7-273a}$$

上式可写成以下更对称的形式

$$\begin{pmatrix} \sigma' & \mu' & \nu'_{\beta'} \\ \sigma'' & \mu'' & \nu''_{\beta''} \\ \sigma_\theta & \mu_\varphi & \nu_{\tau,\beta} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \sigma' & \sigma'' & \sigma_\theta \\ \mu' & \mu'' & \mu_\varphi \\ \nu'_{\beta'} & \nu''_{\beta''} & \nu_{\beta,\tau} \end{pmatrix}. \tag{7-273b}$$

(2) 利用 ORC 对称性(4-162a)式和置换群表象变换系数对称性(4-180a)式,由(7-270a)式得到

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{\nu'\beta'\sigma'\mu',\nu''\beta''\sigma''\mu''} = \epsilon C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta[\tilde{\sigma}]\theta[\tilde{\mu}]\varphi}_{\tilde{\nu}'\beta'\tilde{\sigma}'\tilde{\mu}',\tilde{\nu}''\beta''\tilde{\sigma}''\tilde{\mu}''}. \tag{7-273c}$$

这里 $\epsilon=\pm1$ 决定于位相约定.

$S\mathscr{U}_{m+n} \supset S\mathscr{U}_m \otimes S\mathscr{U}_n$ ISF 和 $S\mathscr{U}_{m+n}$ 9ν 系数的关系见(9-26)式.

§7.18 SU_n 群单态因子

由于 SU_n 单态因子不明显依赖于 n, 因此给出了一个 SU_n 单态因子也就给出了无穷多个 SU_m 单态因子:

$$(SU_mSF) = (SU_nSF), \quad m=n+1,\ n+2,\ \cdots \tag{7-274a}$$

当然并非所有的 SU_nSF 都能从 $SU_{n-1}SF$ 导出, 这是因为 SU_{n-1} 的 IR 所对应的杨图至多只能有 $n-1$ 行. 我们称这些可从 $SU_{n-1}SF$ 导出的 SU_nSF 为可导单态因子, 否则称为不可导单态因子. 可以用以下方法来判断一个(SU_nSF)是不是可导的 (即能不能从 $r\leqslant n-1$ 的 (SU_rSF)导出), 这只需看(7-269b)式中杨图$[\sigma]$的行数, 若$[\sigma]=[a_1, a_2, \cdots, a_r]$, $a_r\neq0$(即杨图$[\sigma]$的行数为 r), 则(SU_rSF)为不可导, 而其余 $n>r$ 的(SU_nSF)均可从(SU_rSF)导出

$$(SU_nSF) = (SU_rSF), \quad n=r+1,\ r+2,\ \cdots. \tag{7-274b}$$

由(7-147)式以及 (7-274) 式可知, Gelfand 表象下 SU_n 群 CG 系数的计算归结为少数不可导单态因子的计算, 不可导单态因子又可从(7-270)式求出.

SU_n 群单态因子和 n 无关这一明显的事实长期没有被人注意到, 是由于通常不用配分$[\nu]$、$[\sigma]$、$[\mu]$等而用其它量子数来标志 SU_n, SU_{n-1} 和 U_1 的 $IR[\nu]$, $[\sigma]$和$[\mu]$, 如表 7.17 所示.

表 7.18-1 $IR[\nu]$, $[\sigma]$, $[\mu]$的常见的几种标志方法

	$[\nu]$	$[\sigma]$	$[\mu]$
SU_2 CG 系数	同位旋 I		$I_z=\frac{1}{2}(n_1-n_2)$[1]
$SU_3\supset SU_2\times U_1$ ISF	$(\lambda\mu)$ 或 SU_3 IR 的维数	$2I+1$	超荷 $Y=\frac{1}{3}(n_1+n_2-2n_3)$
$SU_4\supset SU_3\times U_1$ ISF	SU_4 IR 的维数	SU_3 IR 的维数	$Z=\frac{1}{4}(n_1+n_2+n_3-3n_4)$

1) 这里 $[\sigma]=[n_1]$, $[\mu]=[n_2]$.

以前对(SU_nSF)是逐个 n 计算的, 逐个 n 列表的, 现在既然找到了关系(7-274)式, 自然会想到对列表方式也进行改革, 使得一个 SF 表同时就给出无穷多个 SF 表.

Rotenberg 等 (1959) 及金星南等计算了 SU_2 CG 系数 (即 SU_1SF), Swart (1963)

表 7.18-2 $SU_n \supset SU_{n-1} \otimes U_1$ ISF $C^{[\nu],[3][3]}_{[3][\sigma'][\mu'],[3][\sigma''][\mu'']}$

(SU_2CGC)	(SU_2SF)	(SU_3SF)		[33] 0 (10*) $\underline{50}$	[42] 1 (27) $\underline{126}$	[6] 3 (28) $\underline{84''}$	[51] 2 (35) $\underline{140}$
0	4, −1	(10), $-\frac{3}{2}$	$[\sigma'][\mu']$ $[\sigma''][\mu'']$				
$\frac{3}{2}\ -\frac{3}{2},\ \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}$	1, −2; 4, 1	(1) $-\frac{9}{4}$, (10) $\frac{3}{4}$	[0] [3] [3] [0]	$-\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}\ -\frac{1}{2},\ \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}$	2, −1; 3, 0	(3) $-\frac{5}{4}$, (6) $-\frac{1}{4}$	[1] [2] [2] [1]	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	$-\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{2}\ -\frac{1}{2}$	3, 0; 2, −1	(6) $-\frac{1}{4}$, (3) $-\frac{5}{4}$	[2] [1] [1] [2]	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2}$
$\frac{3}{2}\ \frac{3}{2},\ \frac{3}{2}\ -\frac{3}{2}$	4, 1; 1, −2	(10) $\frac{3}{4}$, (1) $-\frac{9}{4}$	[3] [0] [0] [3]	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{2\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2\sqrt{5}}$	$\frac{1}{2}$

1) 表头意义为

SU_1SF (SU_2CGC) I_z	(SU_2SF) λ, Y	(SU_3SF) $(h_\sigma)Z$	$\begin{pmatrix}[\nu']\\ [\sigma'][\mu']\end{pmatrix}\begin{pmatrix}[\nu'']\\ [\sigma''][\mu'']\end{pmatrix}$ \ $\begin{pmatrix}[\nu]\\ [\sigma][\mu]\end{pmatrix}$	图 I (h_ν) $\underline{H_\nu}$	SU_1SF SU_2SF SU_3SF
$I'I'_zI''I''_z$	$\lambda'Y'$, $\lambda''Y''$	$(h_{\sigma'})Z'$, $(h_{\sigma''})Z''$	图	(系数值)	

这里对 SU_3SF 用 $\lambda=2I+1$ 标志 SU_2 的不可约表示,用维数 (h), $\underline{H}$ 分别标志 SU_3 和 SU_4 的不可约表示(见附录表 A1)。

2) 这里整个杨图标志 SU_n 群的 IR, 去掉填以数字 n 的方块,剩下的图形标志 SU_{n-1} 的 IR。

3) 更多的例子见文献[10]。

表 7.18-3 $SU_n \supset SU_{n-1} \otimes U_1$ ISF $C^{[\nu]\tau,[21][2]}_{[21][\sigma'][\mu'],[21][\sigma''][\mu'']}$, $\tau = D, F$

SU_3SF	SU_3SF			[321]D (8D) 64D	[321]F (8F) 64F	[411] (10) 70	[33] (10*) 50	[42] (27) 126
λ, Y 3, 0	$(h_\sigma), Z$ (15), $-\frac{1}{2}$		$[\sigma'][\mu'], [\sigma''][\mu'']$					
$\lambda'Y', \lambda''Y''$ 1, 0; 3, 0	$(h_{\sigma'})Z', (h_{\sigma''})Z''$ $(3^*)-\frac{1}{4}$, $(6)-\frac{1}{4}$		[11][1], [2][1]	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{10}}$
2, −1; 2, 1	$(3)-\frac{5}{4}$, $(8)\frac{3}{4}$		[1][2], [21][0]	$-\sqrt{\frac{3}{10}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
2, 1; 2, −1	$(8)\frac{3}{4}$, $(3)-\frac{5}{4}$		[21][0], [1][2]	$-\sqrt{\frac{3}{10}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
3, 0; 1, 0	$(6)-\frac{1}{4}$, $(3^*)-\frac{1}{4}$		[2][1], [11][1]	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3}{10}}$
3, 0; 3, 0	$(6)-\frac{1}{4}$, $(6)-\frac{1}{4}$		[2][1], [2][1]	0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	0

Haacke 等 (1976) 计算了 $(SU_2 SF)$ 和 $(SU_3 SF)$. 表 7.18-2 和表 7.18-3 将这些有关的值列在同一表内, 每一个表可给出所有 $n \geqslant r$ (r 为杨图$[\sigma]$的行数)的$(SU_n SF)$. 表上同时列出了 $n=1, 2, 3$ 时(表 7.18-2)和 $n=2, 3$ 时(表 7.18-3)所对应的量子数.

§7.19 母分系数的二次量子化表达式

总母分系数可用二次量子化的形式表示出来, 这常常是很有用的. 本节我们用圆括号代表二次量子化态. 下面的讨论对费米子和玻色子均适用.

1. 单粒子母分系数

设有 n 个全同费米子, 处于某一状态$\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right)$, 这是一个 $SU_N \supset SO_3$ 分类基, α 为附加量子数. α 可以是插在 SU_N 和 SO_3 之间的另一个群(或几个群)的 IR 标志. 令 $b_{jm}^{\dagger}$ 和 b_{jm} 为产生和消灭算符. 将粒子数算符

$$\hat{n}=\sum_{jm} b_{jm}^{\dagger} b_{jm} \tag{7-275}$$

作用于态$\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right)$, 我们有

$$n\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right)=\sum_{jm} b_{jm}^{\dagger} b_{jm}\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right).$$

在 $b_{jm}^{\dagger}$ 和 b_{jm} 之间插入一个幺算符, 得到

$$\begin{aligned}
n\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right) &= \sum_{\alpha_1 J_1 M_1 jm} b_{jm}^{\dagger}\left|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right)\left(\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right| b_{jm}\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right) \\
&= \sum_{\alpha_1 J_1 M_1 jm} b_{jm}^{\dagger}\left|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right)\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right| b_{jm}^{\dagger}\left|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right) \\
&= \sum_{\alpha_1 J_1 j}(-1)^{J_1+j-J}\left[b_j^{\dagger}\left|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right)\right]_M^J\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| b_j^{\dagger}\left\|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right),
\end{aligned} \tag{7-276}$$

上式左乘$\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right|$得

$$n=\sum_{\alpha_1 J_1 j}\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| b_j^{\dagger}\left\|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right)^2. \tag{7-277}$$

一个全反对称态的单粒子母分系数展开式为

$$\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha JM\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\alpha_1 J_1 j}\langle[1^n]\alpha J|\}[1^{n-1}]\alpha_1 J_1, j\rangle\left[\left|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right\rangle\psi_j(n)\right]_M^J, \tag{7-278}$$

比较 (7-276)式和(7-278)式, 可知约化矩阵元比例于单粒子母分系数

$$\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| b_j^{\dagger}\left\|\begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right)=\text{const}\langle[1^n]\alpha J|\}[1^{n-1}]\alpha_1 J_1, j\rangle. \tag{7-279}$$

根据(7-277)式, (7-279)式以及母分系数的归一性, 得到

$$\text{const}=\sqrt{n}.$$

于是

$$\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| b_j^\dagger \left\| \begin{matrix}[1^{n-1}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right) = \binom{n}{1}^{1/2} \langle [1^n]\alpha J | \} [1^{n-1}]\alpha_1 J_1,\ j\rangle. \tag{7-280}$$

上式的物理意义是十分清楚的，它告诉我们，从 n 个费米子的一个全反对称态分出任一个费米子的几率是从同一态分出第 n 个费米子的几率的 n 倍

2. 双粒子母分系数

容易验证，对费米子和玻色子都有以下恒等式

$$\sum_{j_1 m_1 j_2 m_2} b_{j_1 m_1}^\dagger b_{j_2 m_2}^\dagger b_{j_2 m_2} b_{j_1 m_1} = \hat{n}^2 - \hat{n}, \tag{7-281}$$

将上式作用于状态 $\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J M\end{matrix}\right\rangle$ 得

$$n(n-1)\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J M\end{matrix}\right\rangle = \sum_{j_1 m_1 j_2 m_2 \alpha_1 J_1 M_1} b_{j_1 m_1}^\dagger b_{j_2 m_2}^\dagger \left|\begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right\rangle \left(\begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1 M_1\end{matrix}\right| b_{j_2 m_2} b_{j_1 m_1} \left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J M\end{matrix}\right). \tag{7-282}$$

利用关系式

$$\sum_{j_1 j_2} = \frac{2}{1+\delta_{j_1 j_2}} \sum_{j_1 \leqslant j_2}, \tag{7-283}$$

以及归一化对产生算符

$$\mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J_2 M_2) = \sqrt{\frac{1}{1+\delta_{j_1 j_2}}}\,[b_{j_1}^\dagger b_{j_2}^\dagger]_{M_2}^{J_2}, \tag{7-284}$$

(7-282)式可改写成

$$n(n-1)\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J M\end{matrix}\right\rangle = 2\sum_{j_1 \leqslant j_2} \sum_{\alpha_1 J_1 J_2} (-1)^{J_1+J_2-J} \left[\mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J_2) \left|\begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right\rangle\right]_M^J \times \left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| \mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J_2) \left\| \begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right). \tag{7-285}$$

所以

$$\frac{n(n-1)}{2} = \sum_{j_1 \leqslant j_2} \sum_{\alpha J_1 J_2} \left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| \mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J_2) \left\| \begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right)^2. \tag{7-286}$$

另一方面，用母分系数展开可得

$$\left|\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J M\end{matrix}\right\rangle = \sum_{j_1 < j_2, \alpha J_1 J_2} \langle [1^n]\alpha J_2 | \} [1^{n-2}]\alpha_1 J_1,\ [1^2](j_1 j_2) J_2\rangle \left[\left|\begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right\rangle \left|\begin{matrix}[1^2]\\ (j_1 j_2) J_2\end{matrix}\right\rangle\right]_M^J. \tag{7-287}$$

这里求和限制 $j_1 \leqslant j_2$，否则上式右边的状态是过完备的．比较(7-285)式和(7-287)式，我们可知

$$\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| \mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J_2) \left\| \begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right) = \text{const}\,\langle [1^n]\alpha J | \} [1^{n-2}]\alpha_1 J_1,\ [1^2](j_1 j_2) J_2\rangle. \tag{7-288}$$

由(7-286)，(7-288)式以及母分系数的归一性

$$\sum_{j_1 < j_2, \alpha J_1 J_2} \langle [1^n]\alpha J | \} [1^{n-2}]\alpha_1 J_1,\ [1^2](j_1 j_2) J_2\rangle^2 = 1, \tag{7-289}$$

我们最后得到

$$\left(\begin{matrix}[1^n]\\ \alpha J\end{matrix}\right\| \mathscr{A}^\dagger(j_1 j_2 J) \left\| \begin{matrix}[1^{n-2}]\\ \alpha_1 J_1\end{matrix}\right) = \binom{n}{2}^{1/2} \langle [1^n]\alpha J | \} [1^{n-2}]\alpha_1 J_1,\ [1^2](j_1 j_2) J_2\rangle. \tag{7-290}$$

其物理意义仍然是十分清楚的.

3. 互作用玻色子模型(IBM)中的母分系数

在原子核的互作用玻色子模型(Arima, Iachello)中，存在两种玻色子 $b_l^\dagger$，$l=0$ 和 2，它们荷载 SU_6 的基本表示，并属于 SU_3 的 IR (20). $SU_6\supset SU_3\supset SO_3$ 分类下的双玻色态可表为

$$\left|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2M_2\end{matrix}\right)=\sum_{l_1\le l_2}C^{(\lambda_2\mu_2)L_2}_{(20)l_1,(20)l_2}\mathscr{A}^\dagger(l_1l_2L_2M_2). \tag{7-291a}$$

上式右方第一个因子为 $SU_3\supset SO_3$ ISF. 根据 Elliott (1958)，这里所允许出现的 $(\lambda_2\mu_2)L_2$ 为 $(40)S, D, G$ 和 $(02)S, D$. (7-291a)式之逆展开为

$$\mathscr{A}^\dagger(l_1l_2L_2M_2)=\sum_{\lambda_2\mu_2}C^{(\lambda_2\mu_2)L_2}_{(20)l_1,(20)l_2}\left|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2M_2\end{matrix}\right). \tag{7-291b}$$

对单粒子母分系数有

$$\left(\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)L\end{matrix}\right\|b_l^\dagger\left\|\begin{matrix}[n-1]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right)=\binom{n}{1}^{1/2}C^{[n],(\lambda\mu)L}_{[n-1](\lambda_1\mu_1)L_1,[1](20)l}. \tag{7-292}$$

对双粒子母分系数，我们要利用一个类似于(7-285)式的关系式

$$n(n-1)\left|\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)LM\end{matrix}\right)=2\sum_{l_1\le l_2}\sum_{(\lambda_1\mu_1)L_1L_2}(-1)^{L_1+L_2-L}\left[\mathscr{A}^\dagger(l_1l_2L_2)\left|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right)\right]^L_M$$
$$\times\left(\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)L\end{matrix}\right\|\mathscr{A}^\dagger(l_1l_2L_2)\left\|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right). \tag{7-293}$$

利用(7-291)式，(7-293)式变成

$$n(n-1)\left|\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)LM\end{matrix}\right)=2\sum_{(\lambda_1\mu_1)L_1(\lambda_2\mu_2)L_2}(-1)^{L_1+L_2-L}\left[\left|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2\end{matrix}\right)\left|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right)\right]^L_M$$
$$\times\left(\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)L\end{matrix}\right\|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2\end{matrix}\left\|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right). \tag{7-294}$$

因此

$$\frac{n(n-1)}{2}=\sum_{(\lambda_1\mu_1)L_1(\lambda_2\mu_2)L_2}\left(\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)L\end{matrix}\right\|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2\end{matrix}\left\|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right)^2. \tag{7-295}$$

于是 IBM 中双玻色母分系数的二次量子化表达式为

$$\left(\begin{matrix}[n]\\(\lambda\mu)L\end{matrix}\right\|\begin{matrix}[2]\\(\lambda_2\mu_2)L_2\end{matrix}\left\|\begin{matrix}[n-2]\\(\lambda_1\mu_1)L_1\end{matrix}\right)=\binom{n}{2}^{1/2}C^{[n](\lambda\mu)L}_{[n-2](\lambda_1\mu_1)L_1,[2](\lambda_2\mu_2)L_2}. \tag{7-296}$$

将(7-292)式和(7-296)式推广到其它群链是直截了当的.

第八章　点　　群

本章只介绍点群的一些基本知识，重点放在如何用本征函数法来处理点群表示问题. 有关点群的更详细的内容可参考 McWeeny 或 Cotton 的书.

§8.1　点群的基本操作

对称操作：很多物体(或称为系统)，无论是微观的或宏观的，都具有一定的对称性，例如原子核、原子、分子、雪花、正三角形、六角螺帽、正多角锥、正多角柱、正立方体等等. 保持一个系统的几何形状不变的操作(或说将一个系统带到和它自身相重合的操作)称为该系统的对称操作. 这些操作不改变物体内任意两点间的距离，它们的全体构成一个群，称为该系统的*对称群*.

对称点群：有限系统的对称群称为对称点群，简称为点群(因为这些对称操作必须保持系统内至少一个点固定不动).

点群的自然表示：显然，点群是三维正交变换群 O_3 的子群. x, y, z 荷载了 O_3 的基本表示(因而当然是 O_3 的一个真实的(faithful)不可约表示)，它自然也荷载了 O_3 的子群——点群的一个表示，记为 D，不妨称它为点群的自然表示，当然它也是点群的真实表示，但可能是可约表示.

等价原子：分子中等价原子是指那些在对称操作下互换的原子. 等价原子必须是同一化学类型的.

点群的基本操作及其自然表示

点群的基本操作很简单，不外乎以下几种：

(1) 真转动(proper rotation，或称为*纯转动*)

绕空间某一轴 $\boldsymbol{n}$ 转过 $\frac{2\pi}{l}$ 弧度的转动记为 C_l^n，其中最大的一个 l 称为转动轴 $\boldsymbol{n}$ 的阶数或度(fold). 一个点群可能有好几个转动轴，阶数最高的轴称为主轴. 通常将主轴选为 z 轴. 由(2-60b)式知，C_l^z 的自然表示为

$$D(C_l^z)=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi}{l} & -\sin\frac{2\pi}{l} & 0\\ \sin\frac{2\pi}{l} & \cos\frac{2\pi}{l} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{8-1}$$

为了简洁，在不会引起混淆的地方，省去 C_l^z 中的上标 z，于是

$$\begin{gathered}C_l=e^{-i\left(\frac{2\pi}{l}\right)J_z},\ C_l^k=e^{-i\left(\frac{2k\pi}{l}\right)J_z}=C_{l/k}=(C_l)^k,\\ C_l^{l-1}=C_l^{-1},\ C_l^l=e,\end{gathered} \tag{8-2}$$

显然，所有真转动的自然表示矩阵的行列式为 +1. $\{C_l^k\}$，$k=1, 2, \cdots l$ 构成一个阿贝尔群，

即循回群.

假定点群 G 中除了有一个 l 度 z 轴外，还有两个垂直于 z 轴且夹角为 φ 的二度轴，取其中之一为 x 轴，而另一个在 $\boldsymbol{n}_\varphi$ 方向(见图 8.1-1)，显然有

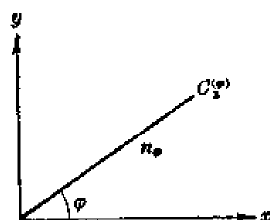


图 8.1-1

$$C_2^{(\varphi)} \equiv C_2^{n_\varphi} = R_z(\varphi) C_2^x R_z^{-1}(\varphi), \tag{8-3}$$

$$D(C_2^x) = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & -1 & \\ 0 & & -1 \end{pmatrix}, \tag{8-4}$$

式中 $R_z(\varphi)$ 为绕 z 轴转动 φ 角的操作. (8-3)式的几何意义是，绕 $\boldsymbol{n}_\varphi$ 转 π 角等价于(1)先将 $\boldsymbol{n}_\varphi$ 轴经转动 $R_z(-\varphi)$ 转到 x 轴. (2)绕 x 轴转 π. (3)再将 x 轴经转动 $R_z(\varphi)$ 转回到 $\boldsymbol{n}_\varphi$.

等价操作：若群 G 的某一操作 C 作用于操作 A，使 A 变到 B，则说操作 A 和操作 B 等价，它们之间的关系为

$$B = CAC^{-1}. \tag{8-5}$$

等价轴：若一个轴 A 被一个操作 C 变为另一个轴 B，且 C 为点群的一个元素，则称 A 和 B 为等价轴.

例如在(8-3)式中，若 $R_z(\varphi)$ 为点群 G 的一个元素，则 $C_2^{n_\varphi}$ 和 C_2^x 为等价操作，$\boldsymbol{n}_\varphi$ 和 x 为等价轴.

双向轴：若点群中有一操作把一转动轴 $\boldsymbol{n}$ 带到 $-\boldsymbol{n}$，则称 $\boldsymbol{n}$ 为双向轴.

例如在图 8.1-1 中，若 C_2^x 为点群的一个元素，y 轴为一转动轴，则 y 为双向轴，因为 C_2^x 把 y 轴变到 $-y$ 轴.

由(5-32)式得到 $R_z(\varphi)$ 的自然表示：

$$D(R_z(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8-6}$$

由(8-3)式—(8-6)式立即得到

$$D(C_2^{(\varphi)}) = \begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0 \\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{8-7}$$

由(8-4)式和(8-7)式我们看到

$$D(C_2^{(\varphi)}) D(C_2^x) = D(R_z(2\varphi)). \tag{8-8a}$$

由于 D 为真实表示，由此得到一个重要关系

$$C_2^{(\varphi)} C_2^x = R_z(2\varphi). \tag{8-8b}$$

即绕 xy 平面中互成 φ 角的两个轴各转动 π 角的乘积等于绕 z 轴转 2φ 角.

因此若群 G 有两个互成 φ 角的二度轴，则必有一个 n 度轴，$n = 2\pi/2\varphi = \pi/\varphi$；反之，若群 G 有一个 n 度轴和一个与它垂直的二度轴，则必然有 n 个二度轴，而相邻二轴之间的夹角为 $\varphi = \frac{\pi}{n}$.

令(8-7)式中 $\varphi = \frac{\pi}{2}$ 得

$$D(C_2^y)=\begin{pmatrix}-1 & & 0\\ & 1 & \\ 0 & & -1\end{pmatrix}. \tag{8-9}$$

由(8-4)、(8-9)式得 $[D(C_2^x),\ D(C_2^y)]=0$, 所以

$$[C_2^x,\ C_2^y]=0. \tag{8-10}$$

因此绕互相垂直的轴转 π 角度的操作为对易.

(2) 水平反射面 σ_h

操作 σ_h 为对通过原点并垂直于主轴的平面 (xy 平面)作镜面反射. 操作 σ_h 只有一个. 下面经常用 σ^n 表示法线方向为 $\boldsymbol{n}$ 的一个反射面. 因此 $\sigma_h=\sigma^z$,

$$D(\sigma^z)=D(\sigma_h)=\begin{pmatrix}1 & & 0\\ & 1 & \\ 0 & & -1\end{pmatrix}, \tag{8-11a}$$

$$\det(D(\sigma_h))=-1. \tag{8-11b}$$

由(8-6)、(8-11)式得到 $[D(\sigma^z),\ D(R_z(\varphi))]=0$, 所以

$$[\sigma^z,\ R_z(\varphi)]=0. \tag{8-12}$$

即转动和垂直于转动轴的平面反射互相对易.

平面分子都具有 σ_h 对称性,分子平面就是反射面.

(3) 垂直反射面 σ_v

操作 σ_v 为对包含主轴的一个平面作镜面反射. 假定群 G 有两个垂直反射面, $\sigma^n=\sigma^{(\varphi)}$ 和 $\sigma^y=\sigma^{(0)}$, φ 为法线 $\boldsymbol{n}$ 和 y 轴夹角, 或者说反射面 σ^n 和 xy 平面的交线相对于 x 轴的夹角, 见图 8.1-2. 由图 8.1-2 可知

$$\sigma^{(\varphi)}=\sigma^n=R_z(\varphi)\sigma^y R_z(-\varphi), \tag{8-13}$$

$$D(\sigma^{(0)})=D(\sigma^y)=\begin{pmatrix}1 & & 0\\ & -1 & \\ 0 & & 1\end{pmatrix}. \tag{8-14}$$

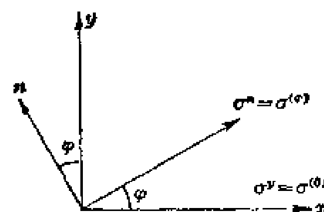


图 8.1-2

由(8-13)、(8-14)式和(8-6)式得:

$$D(\sigma^{(\varphi)})=\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & \sin 2\varphi & 0\\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{8-15}$$

由(8-14)、(8-15)式又得到:

$$D(\sigma^{(\varphi)})D(\sigma^{(0)})=D(R_z(2\varphi)), \tag{8-16}$$

$$\sigma^{(\varphi)}\sigma^{(0)}=R_z(2\varphi). \tag{8-17}$$

即互成 φ 角的两个垂直反射面操作的乘积等于绕 z 轴转过 2φ 角.

因此若群 G 有两个互成 φ 角的垂直反射面, 则意味着群 G 必有一个 n 度轴, $n=2\pi/2\varphi=\pi/\varphi$; 反之,若群 G 有一个 n 度轴,并有一个垂直反射面, 则必有 n 个反射面,相邻两个反射面的夹角为 $\varphi=\pi/n$.

令(8-15)式中 $\varphi=\pi/2$, 得

$$D(\sigma^x)=D(\sigma^{(\pi/2)})=\begin{pmatrix}-1 & & 0\\ & 1 & \\ 0 & & 1\end{pmatrix} \tag{8-18}$$

由(8-14)式、(8-18)式得$[D(\sigma^{(\pi/2)}),\ D(\sigma^{(0)})]=0$, 所以

$$[\sigma^{(\pi/2)},\ \sigma^{(0)}]=0. \tag{8-19}$$

因此互相垂直的两个反射面的反射操作互相对易.

等价平面　若(8-13)式中$R_z(\varphi)$为群G的一个元素, 则称σ^n和σ^x为等价的反射面.

由(1)(2)两种操作相乘又可得到以下两种基本操作:

(4) 原点反演(Inversion)

$$I=C_2^z\sigma_h=\sigma_hC_2^z,\ \sigma^z=\sigma_h=C_2^zI. \tag{8-20}$$

由上式及(8-6)式、(8-11)式得

$$D(I)=\begin{pmatrix}-1 & & 0\\ & -1 & \\ 0 & & -1\end{pmatrix}. \tag{8-21}$$

即$D(I)$为单位矩阵乘(-1). 因此反演I和任一转动或反射都对易.

(5) 非真转动(improper rotation)(或称为转动反射 rotation reflection)

定义非真转动S_n^z为先绕z轴转$2\pi/n$, 然后再作水平反射(或次序倒过来)

$$S_n^z=C_n^z\sigma_h=\sigma_hC_n^z=C_n^z\sigma^z. \tag{8-22}$$

由(8-1)式、(8-11)式得

$$D(S_n^z)=\begin{pmatrix}\cos\frac{2\pi}{n} & -\sin\frac{2\pi}{n} & 0\\ \sin\frac{2\pi}{n} & \cos\frac{2\pi}{n} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{8-23}$$

根据(8-20)式、(8-22)式, S_n^z又可表为转动乘反演

$$S_n^z=C_n^zC_2^zI, \tag{8-24a}$$

利用(8-2)得

$$C_n^zC_2^z=\exp\left[-2\pi i\left(\frac{2+n}{2n}\right)J_z\right]=\exp\left[i\frac{2\pi}{\varkappa}J_z\right]=\bar{C}_\varkappa^z, \tag{8-24b}$$

这里

$$\varkappa=\frac{2n}{n-2}, \tag{8-24c}$$

$$\bar{C}_\varkappa^z=(C_\varkappa^z)^{-1}, \tag{8-24d}$$

$$S_3=\bar{C}_6\cdot I,\ S_4=\bar{C}_4\cdot I,\ S_6=\bar{C}_3\cdot I. \tag{8-25}$$

由(8-22)式可知, 当n为偶数时, $\{S_n^k\}$, $k=1,\ 2,\ \cdots,\ n$构成一个群, 记为S_n, 它是一个阿贝尔群,

$$S_n^k=(S_n)^k=\begin{cases}C_n^k & \text{当 } k=\text{偶数}\\ C_n^k\sigma_h & \text{当 } k=\text{奇数}\end{cases} \tag{8-26a}$$

由(8-24a)式得

$$S_2=S_n^{n/2}=I. \tag{8-26b}$$

因此S_n群中必有一个反演中心.

对称元素 (Symmetry Element)：一个转动轴或一个反射面称为点群的一个对称元素.

点群的类：由(8-5)式可知，等价操作的集合就构成点群的类. 点群的类有以下规则

(1) 恒等操作(即幺元素)自成一类.

(2) 反演 I 永远自成一类.

(3) 水平反射 σ_h 自成一类.

(4) 绕等价轴转过相同角度的真(非真)转动属于同一类.

(5) 等价反射面属于同一类.

(6) 对双向轴，任一转动(真转动或非真转动)和其逆转动属于同一类.

点群中常用属于某一类的一个操作并在前面写上该类包含的元素数来标志一个类算符(例如后面表 8.3-4 中，$3C_2=C_2^{(0)}+C_2^{(120°)}+C_2^{(240°)}$).

§8.2 常见点群

常见点群的类别及其生成元由下表给出：

表 8.2-1 常见点群分类表

名称	相互关系	生成元	对称物
$\mathscr{C}_1$		e	无任何对称性的物体
$\mathscr{C}_i$		I	
$\mathscr{C}_s$ 群	$\mathscr{C}_s=\mathscr{C}_{1h}$	σ_h	
$\mathscr{C}_n$ 群		$C_n=e^{-i\left(\frac{2\pi}{n}\right)J_z}$	
$\mathscr{C}_{nv}$		$C_n,\ \sigma_v^{(1)}$	正 n 角锥，或平面正 n 边形
$\mathscr{C}_{nh}$	$\mathscr{C}_{nh}=\mathscr{C}_n\times\mathscr{C}_s$, n=奇或偶 $\mathscr{C}_{nh}=\mathscr{C}_n\times\mathscr{C}_i$, n=偶	$C_n,\ \sigma_h$	
S_n		S_n	
D_n		$C_n,\ C_2^{(1)}$	
D_{nh}	$D_{nh}=D_n\times\mathscr{C}_s$, n=奇或偶 $D_{nh}=D_n\times\mathscr{C}_i$, n=偶	$C_n,\ C_2^{(1)},\ \sigma_h$	正 n 角柱(D_{2h} 为矩形固体的对称群) 正 n 边形对称的平面分子，如 C_6H_6
D_{nd}	$D_{nd}=D_n\times\mathscr{C}_i$, n=奇	$C_n,\ C_2^{(1)},\ \sigma_v^{(1)}$	
T		$C_2^z,\ C_3^{(1)}$	立方体(只包含真转动) $C_3^{(1)}$ 为一个三度轴.
T_d		$S_4^z,\ C_3^{(1)}$	正四面体.
T_h	$T\times\mathscr{C}_i$	$C_2^z,\ C_3^{(1)},\ I$	
O		$C_4^z,\ C_3^{(1)}$	立方体(只包含真转动)，正八面体.
O_h	$O_h=O\times\mathscr{C}_i$	$C_4^z,\ C_3^{(1)},\ I$	立方体，正八面体.

McWeeny(1963)给出了这些群的元素及其按类的划分. 作为例子，图 8.2-1 给出了具有 $\mathscr{C}_{3v}$, D_3, D_{3h}, D_{3d} 对称性的四种分子构型，图 8.2-2 给出了它们在 xy 平面上的投影图及其对称操作(C_3, C_3^2 操作未画出).

其它 $\mathscr{C}_{nv}$, D_n, D_{nh}, D_{nd} 群可按此类推. $\mathscr{C}_{nv}$, D_n, D_{nh}, D_{nd} 通称为轴对称群(axial group). 下面着重讨论较复杂的四面体群和八面体群.

图 8.2-3 中，一个立方体内接了一个正四面体. T 群为描绘正四面体对称性的转动群

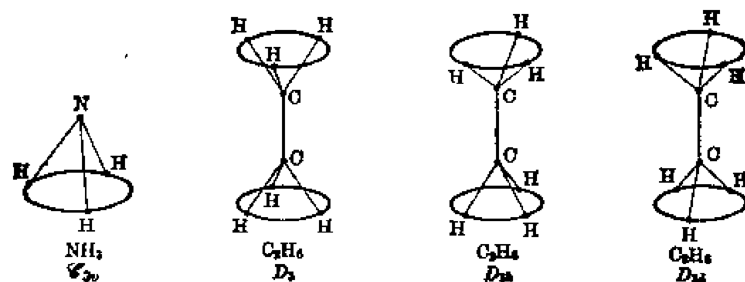


图 8·2-1 $\mathscr{C}_{3v}$, D_3, D_{3h} 和 D_{3d} 对称的分子构型

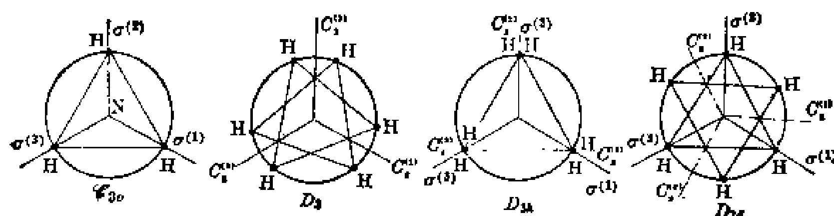


图 8.2-2

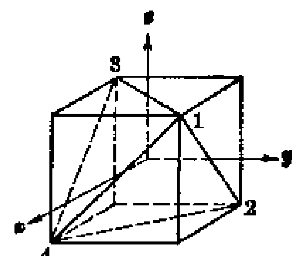


图 8.2-3 四面体群 T_d

(即由纯转动操作构成的群). 由图 8.2-3 看到, 现在共有三个 2 度轴(通过不相邻的两条棱的中点, 即 C_2^x, C_2^y, C_2^z), 和四个 3 度轴 $C_3^{(i)}$ ($i=1, 2, 3, 4$), 它们从原点出发通过四面体的四个顶点 1, 2, 3, 4 (以向外方向为正方向).

根据在对称操作下, 顶点的变换关系很容易找到点群和置换群的子群的对应关系, 列在表 8.2-2 的第一行.

表 8.2-2 T 群与 A_4 群的同构关系和 T_d 群与 S_4 群的同构关系

e	C_2^x	C_2^y	C_2^z	$C_3^{(1)}$ C_3^{xyz}	$C_3^{(2)}$ $C_3^{\bar{x}yz}$	$C_3^{(3)}$ $C_3^{\bar{x}\bar{y}z}$	$C_3^{(4)}$ $C_3^{\bar{x}y\bar{z}}$	$\bar{C}_3^{(1)}$	$\bar{C}_3^{(2)}$	$\bar{C}_3^{(3)}$	$\bar{C}_3^{(4)}$
e	(14)(23)	(12)(34)	(13)(24)	(234)	(143)	(124)	(132)	(243)	(134)	(142)	(123)

S_4^z	$\bar{S}_4^z$	S_4^x	$\bar{S}_4^x$	S_4^y	$\bar{S}_4^y$	$\sigma^{(12)}$ σ^{xz}	$\sigma^{(23)}$ σ^{yz}	$\sigma^{(34)}$ $\sigma^{x\bar{z}}$	$\sigma^{(13)}$ σ^{xy}	$\sigma^{(14)}$ $\sigma^{y\bar{z}}$	$\sigma^{(24)}$ $\sigma^{x\bar{y}}$
(1234)	(1432)	(1342)	(1243)	(1423)	(1324)	(12)	(23)	(34)	(13)	(14)	(24)

表 8.2-2 中, $\sigma^{xz}\cdots$, $C_3^{xyz}\cdots$ 等为 McWoony 书上采用的记号. σ^{xz} 代表一个反射面, 它的法线和 x 以及 y 轴的两个夹角相等. $\sigma^{x\bar{z}}$ 代表法线方向和 x 以及 $\bar{z}$ ($\bar{z}=-z$) 轴的两个夹角相等的一个反射面…. C_3^{xyz} 代表转轴和 x, y, z 三个轴的夹角都相等…, 面 $\sigma^{(12)}$ 代表通过棱 (34) 本身和对棱 (12) 的中点的一个反射面, 在 $\sigma^{(ij)}$ 作用下, 顶点 i 和 j 互换, 而 $\bar{C}_3^{(i)}=(C_3^{(i)})^{-1}=(C_3^{(i)})^2$.

T 群共有 12 个元素, 分成四个类 (表 8.2-2 中各类间用竖线 (包括虚线) 隔开. 由表 8.2-2 看到, T 群和置换群 S_4 的子群——交替群 $\mathscr{A}_4$ (见 § 1.3) 同构. 因此, 可利用置换群乘法规则来得出对称操作的乘积, 如由 (234)(143) = (123) 立刻知道 $C_3^{(1)}C_3^{(2)}=\bar{C}_3^{(4)}$.

根据表 8.2-2 可知, e, C_2^x, C_2^y, C_2^z 构成 D_2 群, 它和四群(four group)同构. D_2 是 T 的一个子群.

T_d 群为正四面体的对称群, 除了包含 T 群的 12 个元素外, 还包含另外 12 个元素, 它可

表 8.2-3　O_h 群的元素及其和 S_6 的子群的同构关系

T (O)	e e	C_2^x (24) (56)	C_2^y (13) (56)	C_2^z (13) (24)	$C_3^{(1)}$ (164) (235)	$C_3^{(2)}$ (126) (345)	$C_3^{(3)}$ (154) (236)	$C_3^{(4)}$ (125) (346)	$\overline{C}_3^{(1)}$ (146) (253)	$\overline{C}_3^{(2)}$ (162) (354)	$\overline{C}_3^{(3)}$ (145) (263)	$\overline{C}_3^{(4)}$ (152) (364)
(O)	C_2^{xy} (12) (34) (56)	$C_2^{x\bar{y}}$ (14)(23) (56)	C_2^{xz} (16)(35)(24)	$C_2^{x\bar{z}}$ (15)(36)(24)	C_2^{yz} (13) (26) (45)	$C_2^{y\bar{z}}$ (13)(25)(46)	C_4^x (2645)	C_4^y (1536)	C_4^z (1234)	$\overline{C}_4^x$ (2546)	$\overline{C}_4^y$ (1635)	$\overline{C}_4^z$ (1432)
	I (13) (24) (56)	σ^x (13)	σ^y (24)	σ^z (56)	$S_6^{(1)}$ (126345)	$S_6^{(2)}$ (152364)	$S_6^{(3)}$ (125346)	$S_6^{(4)}$ (162354)	$\overline{S}_6^{(1)}$ (154362)	$\overline{S}_6^{(2)}$ (146325)	$\overline{S}_6^{(3)}$ (164352)	$\overline{S}_6^{(4)}$ (145326)
	σ^{xy} (14) (23)	$\sigma^{x\bar{y}}$ (12) (34)	σ^{xz} (15) (36)	$\sigma^{x\bar{z}}$ (16) (35)	σ^{yz} (25) (46)	$\sigma^{y\bar{z}}$ (26) (45)	S_4^x (2645) (13)	S_4^y (1536) (24)	S_4^z (1234) (56)	$\overline{S}_4^x$ (2546) (13)	$\overline{S}_4^y$ (1635) (24)	$\overline{S}_4^z$ (1432) (56)

表为 $S_4^z T$. 由表 8.2-2 看到,T_d 群和 S_4 同构, 包含 5 个类, T_d 的各个类在表中用实竖线隔开.

八面体群

O 群为描绘八面体对称性的转动群. 正八面体可以内接在一个立方体内, 见图 8.2-4, 因此它也是描绘立方体对称性的转动群.

图 8.2-4　八面体群 O

O 群有以下对称元素:

(1) 三个 4 度轴 C_4^x, C_4^y, C_4^z.

(2) 四个 3 度轴, 它们通过正八面体两相对面的中心, 或者说从立方体中心出发通过立方体的顶点. 原点上方的立方体的四个顶点标以(1), (2), (3), (4), 于是四个 3 度轴记为 $C_3^{(i)}$, $i=1, 2, 3, 4$. 或写成

$$C_3^{(1)}=C_3^{x\bar{y}z},\ C_3^{(2)}=C_3^{xyz},\ C_3^{(3)}=C_3^{\bar{x}yz},\ C_3^{(4)}=C_3^{\bar{x}\bar{y}z}. \quad (8\text{-}27c)$$

(3) 六个 2 度轴, 它们通过八面体的两对棱的中点, 如 C_2^{xy}, $C_2^{x\bar{y}}$, …等(见表 8.2-3). (这里 C_2^{xy} 代表一个二度轴, 它和 x, y 轴的夹角相等, 以此类推).

O 群共有 24 个元素, 分成 5 个类, T 群是 O 的子群. O 群的对称操作和置换群的对应关系见表 8.2-3. O 群和 S_6 的一个子群同构.

O_h 群: 在 O 群上加上反演操作就是 O_h 群, 共有 48 个元素: $O_h=O\oplus O\times I$.

下面给出 O_h 的群操作的一个乘法关系:

由(8-20)式得

$$\sigma^i=C_2^i\cdot I,\ i=x,\ y,\ z,\ xy,\ xz,\ \cdots. \quad (8\text{-}28)$$

表 8.2-3 中第一行构成 T 群, 第一、二行构成 O 群, 第一、三行构成 T_h 群.

32 种晶体点群: 可以证明 (见 Hamermesh), 晶体中可能有的对称点群只有 32 种, 即 $\mathscr{C}_n$, $\mathscr{C}_{nh}$, $\mathscr{C}_{nv}$, D_n, D_{nh}, $n=2, 3, 4, 6$. D_{2d}, D_{3d}, $\mathscr{C}_1$, $\mathscr{C}_i$, $\mathscr{C}_s$, S_4, S_6, T, T_h, T_d, O, O_h.

分子点群：分子点群除了 32 种晶体点群外，还包含以下点群：$\mathscr{C}_5$, $\mathscr{C}_7$, $\mathscr{C}_8$, $\mathscr{C}_{5h}$, $\mathscr{C}_{5v}$, D_5, D_{5h}, D_{5d}, D_{4d}, D_{6d}, D_{8h}, $D_{\infty h}$ 和 $\mathscr{C}_{\infty v}$ 及二十面体群等.

$\mathscr{C}_{\infty v}$ 为无对称中心的线性分子的对称群. 如 CO (见图 8.2-5). $D_{\infty h}$ 为有对称中心的线性分子的对称群，如 H_2, O_2, CO_2 等(见图 8.2-6).

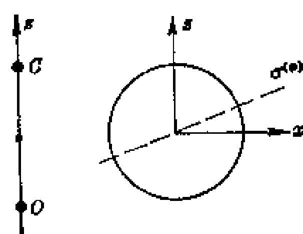


图 8.2-5 CO 分子，$\mathscr{C}_{\infty v}$ 对称性

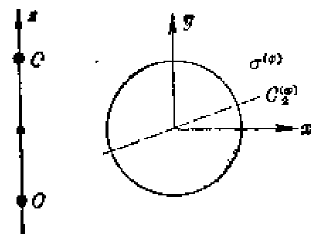


图 8.2-6 O_2 分子，$D_{\infty h}$ 对称群

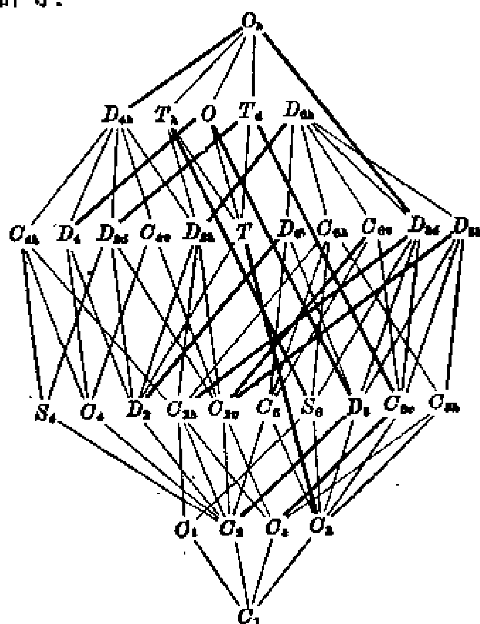


图 8.2-7 32 种晶体点群的子群链

$\mathscr{C}_{\infty v}$ 和 $D_{\infty h}$ 所包含的对称操作为

$$
\begin{aligned}
&\mathscr{C}_{\infty v}=\{R^{(z)}(\varphi),\ \sigma^{(\varphi)}\},\ \varphi=0\text{--}2\pi, \\
&D_{\infty h}=\{R_z(\varphi),\ \sigma^{(\varphi)},\ C_2^{(\varphi)},\ S_z(\varphi),\ I\},\ \varphi=0\text{—}2\pi.
\end{aligned}
\tag{8-29}
$$

32 种晶体点群的子群链

图 8.2-7 给出 32 种晶体点群的子群链 (该图取自 Koster, 1963). 图中粗黑线代表该子群不是不变子群.

§ 8.3 点群的 CSCO-I 和 CSCO-II

点群不可约表示的传统标志：

由于点群的不可约表示的种类不多，传统表示理论中采用以下方法 (称为 Mulliken 记号)来标志不可约表示：

1. 用 A 或 B 表示一维表示，E 为二维表示，T (或 F)为三维表示.

2. A 标志特征标 $\chi(C_n)=1$ 的表示，B 标志 $\chi(C_n)=-1$ 的表示.

3. A_1 或 B_1 代表 $\chi(C_2)=1$ 或 $\chi(\sigma_v)=1$ 的表示(C_2 为垂直主轴的二度轴).

A_2 或 B_2 代表 $\chi(C_2)=-1$ 或 $\chi(\sigma_v)=-1$ 的表示.

4. A', B', E', T' 代表 $\chi(\sigma_h)=1$.

A'', B'', E'', T'' 代表 $\chi(\sigma_h)=-1$.

5. A_g, B_g, E_g, T_g 代表 $\chi(I)=1$(I 为反演操作)的表示.

A_u, B_u, E_u, T_u 代表 $\chi(I)=-1$ 的表示.

由于点群的特征标表都已知道(见 Cotton. Koster. Hamermesh)，因此可利用 § 3.12 方

法不难找到点群的 CSCO–I. 再根据 (3-37) 式由 G_1 或 G_2 的 CSCO–I 又立即可得直积群 $G_1\times G_2$ 的 CSCO–I. 循环群 $\mathscr{C}_n$ 和 S_n 以及 $\mathscr{C}_{nh}$ 群的 CSCO–I 非常简单.

$\mathscr{C}_n$ 群, $C=C_n^z$, $\lambda^{(\nu)}=e^{-2\pi\nu i/n}$, $\nu=0, 1, 2, \cdots, n-1$.

S_{2n} 群, $C=S_{2n}^z$, $\lambda^{(\nu)}=\pm e^{-2\pi\nu i/n}$, $\nu=0, 1, 2, \cdots, n-1$.

$$\begin{aligned}&\mathscr{C}_{nh}\text{ 群}, C=(C_n^z, I), \lambda^{(\nu)}=(e^{-2\pi\nu i/n}, \pm1), \text{对 } n=\text{偶数}.\\&C=(C_n^z, \sigma_h), \lambda^{(\nu)}=(e^{-2\pi\nu i/n}, \pm1), \text{对 } n=\text{奇数}.\end{aligned}\tag{8-30}$$

表 8.3–1 到 8.3–17 给出了点群的 CSCO–I 和 CSCO–II,其中第一列为点群的不可约表示的传统标志方法,第二列给出了常见点群的 CSCO–I 及其本征值. 第三列为子群链 $G(s)$ 的 CSCO, 即算符集 $C(s)$. 第四列为 $(C, C(s))$ 的共同本征函数 (具体求法见 § 8.4). G_1 和 $G_1\times G_2$ 的 CSCO–I 列在一起, 如 D_n 和 $D_{nh}=D_n\times\mathscr{C}_s$; $\mathscr{C}_{nv}$ 和 $D_{nd}=\mathscr{C}_{nv}\times\mathscr{C}_i$ ($n=$奇数); T 和 $T_h=T\times\mathscr{C}_i$; O 和 $O_h=O\times\mathscr{C}_i$. 把 G_2(如 $\mathscr{C}_s$ 或 $\mathscr{C}_i$) 的 CSCO–I(即 σ_h 或 I) 去掉剩下的就构成 G_1 的 CSCO–I. 将这些表中的第一列传统标志记号中的撇号或下标 g(或 u) 去掉, 就给出 G_1 群 IR 的传统标志. 如由表 8.3–5 立刻知道, $\mathscr{C}_{3v}$ 的 CSCO–I 为 $3\sigma_v$, 本征值为 3, −3, 0, 对应于 A_1, A_2, E 三个表示. 当有几种 σ_v(或 C_2)类时, 我们用图明显标出构成 CSCO–I 的是那一个类.

表 8.3 点群的 CSCO–I, CSCO–II, 及其本征值和本征函数

表 8.3–1 D_2, $D_{2h}=D_2\times\mathscr{C}_i$

	C_2^z	C_2^y	I	本 征 函 数
A_g	1	1	1	x^2, y^2, z^2
B_{1g}	−1	−1	1	xy, R_z
B_{2g}	−1	1	1	xz, R_y
B_{3g}	1	−1	1	yz, R_x
A_u	1	1	1	xyz
B_{1u}	−1	−1	−1	z
B_{2u}	−1	1	−1	y
B_{3u}	1	−1	−1	x

1) R_x, R_y, R_z 为轴矢量的三个分量

$D_2=(e, C_2^x, C_2^y, C_2^z)$

$D_{2h}=(e, C_2^x, C_2^y, C_2^z, I, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$

表 8.3–2 $\mathscr{C}_{2v}$

	C_2^z	σ^y	本 征 函 数
A_1	1	1	z, x^2, y^2, z^2
A_2	1	−1	R_z, xy
B_1	−1	1	x, R_y, xz
B_2	−1	−1	y, R_x, yz

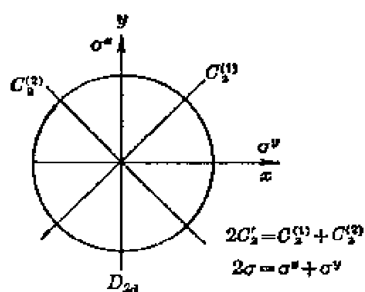
$\mathscr{C}_{2v}=(e, \sigma^x, \sigma^y, C_2^z)$

表 8.3–3 D_{2d} 群

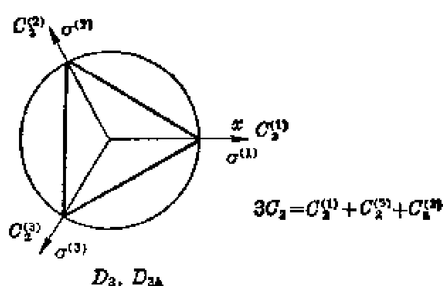
	$2C_2'$	2σ	σ^y	本 征 函 数
A_1	2	2		x^2+y^2, z^2
A_2	−2	−2		R_z
B_1	2	−2		x^2-y^2
B_2	−2	2		z, xy
E	0	0	(1, −1)	(x, y), (xz, yz), $(R_y, -R_x)$

表 8.3–4 D_3, $D_{3h}=D_3\times\mathscr{C}_s$

	$3C_2$	σ_h	$C_2^x=C_2^{(1)}$	本 征 函 数
A_1'	3	1		x^2+y^2, z^2
A_2'	−3	1		R_z
E'	0	1	(1, −1)	(x, y), $(x^2-y^2, -2xy)$
A_1''	3	−1		xR_z
A_2''	−3	−1		z
E''	0	−1	(1, −1)	(R_x, R_y), $(yz, -xz)$



D_{2d}



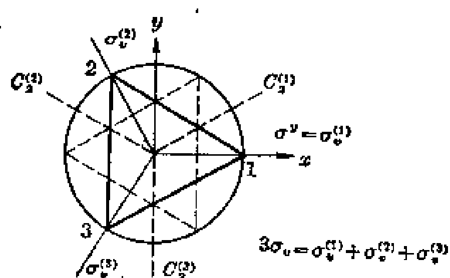
D_3, D_{3h}

表 8.3-5　$\mathscr{C}_{3v}$, $D_{3d}=C_{3v}\times\mathscr{C}_i$

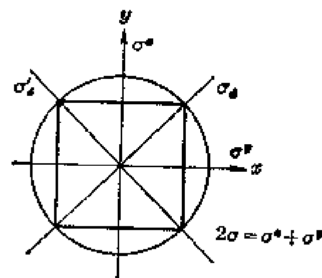
	$3\sigma_v$	I	σ^y	本征函数
A_{1g}	3	1		x^2+y^2, z^2
A_{2g}	−3	1		R_z
E_g	0	1	(1, −1)	$(R_y, -R_x)$, (xz, yz) $(x^2-y^2, -2xy)$
A_{1u}	3	−1		z
A_{2u}	−3	−1		
E_u	0	−1	(1, −1)	(x, y)

表 8.3-6　$\mathscr{C}_{4v}$ 群

	$2C_4^z$	2σ	σ^y	本征函数
A_1	2	2		x^2+y^2, z, z^2
A_2	2	−2		R_z
B_1	−2	2		x^2-y^2
B_2	−2	−2		xy
E	0	0	(1, −1)	(x, y), $(R_y, -R_x)$ (xz, yz)



$\mathscr{C}_{3v}$ 群(实线部分)
D_{3d} 群(包括实线和虚线)



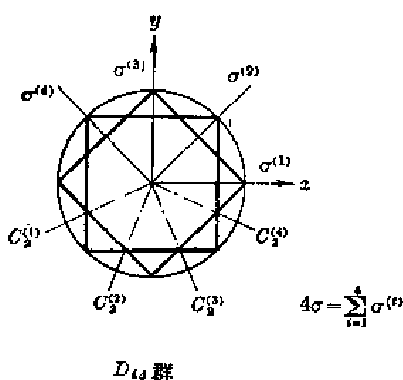
$\mathscr{C}_{4v}$ 群

表 8.3-7　D_{4d} 群

	$2S_8^z$	4σ	σ^y	本征函数
A_1	2	4		x^2+y^2, z^2
A_2	2	−4		R_z
B_1	−2	−4		
B_2	−2	4		z
E_1	$\sqrt{2}$	0	(1, −1)	(x, y)
E_2	0	0	(1, −1)	$(x^2-y^2, -2xy)$
E_3	$-\sqrt{2}$	0	(1, −1)	$(R_y, -R_x)$ (xz, yz)

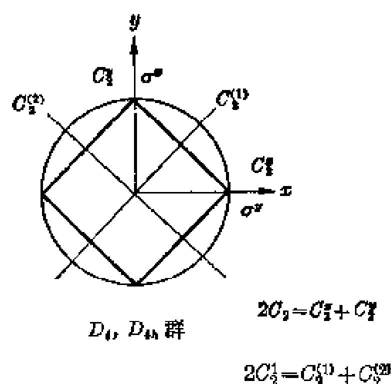
表 8.3-8　D_4, $D_{4h}=D_4\times\mathscr{C}_i$

	$2C_2$	$2C_2'$	I	C_2^x	本征函数
A_{1g}	2	2	1		x^2+y^2, z^2
A_{2g}	−2	−2	1		R_z
B_{1g}	2	−2	1		x^2-y^2
B_{2g}	−2	2	1		xy
E_g	0	0	1	(1, −1)	(R_x, R_y), $(yz, -xz)$
A_{1u}	2	2	−1		
A_{2u}	−2	−2	−1		z
B_{1u}	2	2	−1		
B_{2u}	−2	2	−1		
E_u	0	0	−1	(1, −1)	(x, y)



$4\sigma=\sum_{i=1}^{4}\sigma^{(i)}$

D_{4d} 群



D_4, D_{4h} 群

$2C_2=C_2^x+C_2^y$

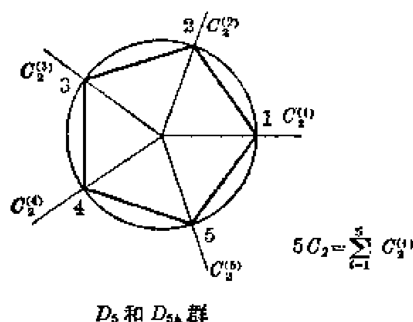
$2C_2'=C_2^{(1)}+C_2^{(2)}$

表 8.3-9　D_5, $D_{5h}=D_5\times\mathscr{C}_s$

	$2C_5^x$	$2C_2$	σ_h	C_2^x	本征函数
A_1'	2	5	1		x^2+y^2, z^2
A_2'	2	−5	1		R_z
E_1'	2 cos 72°	0	1	(1, −1)	(x, y)
E_2'	2 cos 144°	0	1	(1, −1)	$(x^2-y^2, -2xy)$
A_1''	2	5	−1		
A_2''	2	−5	−1		z
E_1''	2 cos 72°	0	−1	(1, −1)	(R_x, R_y), $(yz, -xz)$
E_2''	2 cos 144°	0	−1	(1, −1)	

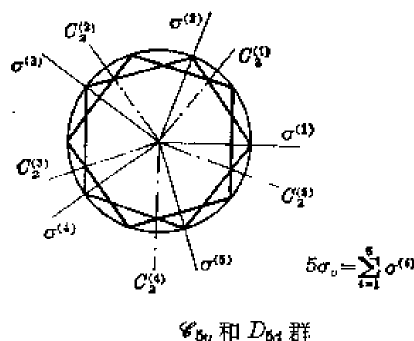
表 8.3-10　$\mathscr{C}_{5v}$, $D_{5d}=\mathscr{C}_{5v}\times\mathscr{C}_i$

	$2C_5^x$	$5\sigma_v$	I	σ_y	本征函数
A_{1g}	2	5	1		x^2+y^2, z^2
A_{2g}	2	−5	1		R_z
E_{1g}	2 cos 72°	0	1	(1, −1)	$(R_y, -R_x)$, (xz, yz)
E_{2g}	2 cos 144°	0	1	(1, −1)	$(x^2-y^2, -2xy)$
A_{1u}	2	5	−1		z
A_{2u}	2	−5	−1		
E_{1u}	2 cos 72°	0	−1	(1, −1)	(x, y)
E_{2u}	2 cos 144°	0	−1	(1, −1)	



$5C_2=\sum_{i=1}^{5}C_2^{(i)}$

D_5 和 D_{5h} 群



$5\sigma_v=\sum_{i=1}^{5}\sigma^{(i)}$

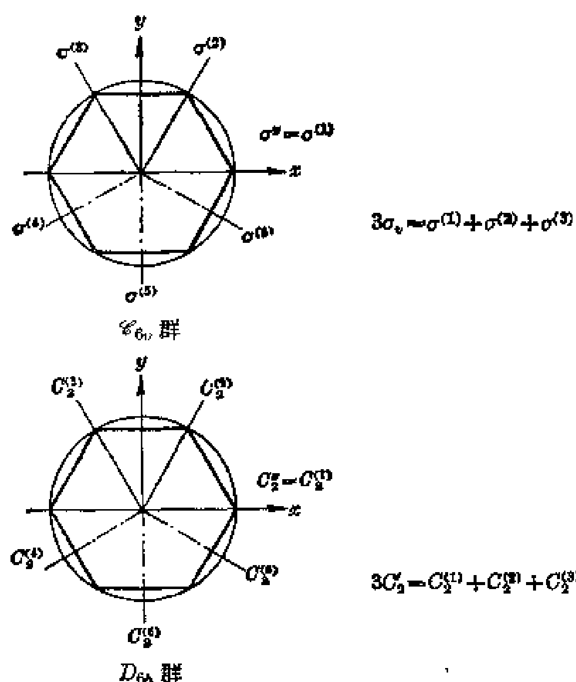
$\mathscr{C}_{5v}$ 和 D_{5d} 群

表 8.3-11　$\mathscr{C}_{6v}$ 群

	$2C_6^x$	$3\sigma_v$	σ^y	本征函数
A_1	2	3		z, x^2+y^2, z^2
A_2	2	−3		R_z
B_1	−2	3		
B_2	−2	−3		
E_1	1	0	(1, −1)	(x, y), $(R_y, -R_x)$, (xz, yz)
E_2	−1	0	(1, −1)	$(x^2-y^2, -2xy)$

表 8.3-12　D_{6d} 群

	$2S_{12}^x$	$6\sigma_d$	σ^y	本征函数
A_1	2	6		x^2+y^2, z^2
A_2	2	−6		R_z
B_1	−2	−6		
B_2	−2	6		z
E_1	$\sqrt{3}$	0	(1, −1)	(x, y)
E_2	1	0	(1, −1)	$(x^2-y^2, -2xy)$
E_3	0	0	(1, −1)	
E_4	−1	0	(1, −1)	
E_5	$-\sqrt{3}$	0	(1, −1)	(R_y-R_x), (xz, yz)



$\mathscr{C}_{6v}$ 群

D_{6h} 群

表 8.3-13　D_6, $D_{6h}=D_6\times\mathscr{C}_i$

	$2C_3^z$	$3C_2'$	C_2^z	本 征 函 数
A_{1g}	2	3		x^2+y^2, z^2
A_{2g}	2	-3		R_z
B_{1g}	-2	3		
B_{2g}	-2	-3		
E_{1g}	1	0	$(1, -1)$	(R_x, R_y), $(yz, -xz)$
E_{2g}	-1	0	$(1, -1)$	$(x^2-y^2, -2xy)$
A_{1u}	2	3		
A_{2u}	2	-3		z
B_{1u}	-2	3		
B_{2u}	-2	-3		
E_{1u}	1	0	$(1, -1)$	(x, y)
E_{2u}	-1	0	$(1, -1)$	

表 8.3-14　$\mathscr{C}_{\infty v}$, $D_{\infty v}=\mathscr{C}_{\infty v}\times\mathscr{C}_i$

	$2C^z(\varphi)$	$\sigma^{(0)}$	I	本 征 函 数
Σ_g^+	1	1	1	z^2, x^2+y^2
Σ_g^-	1	-1	1	R_z
Π_g	$2\cos\varphi$	—	1	(R_x, R_y), (xz, yz)
Δ_g	$2\cos 2\varphi$	—	1	
⋮				
Σ_u^+	1	1	-1	z
Σ_u^-	1	-1	-1	
Π_u	$2\cos\varphi$	—	-1	(x, y) 或 $(e^{i\varphi}, e^{-i\varphi})$
Δ_u	$2\cos 2\varphi$	—	-1	

① 现在有无穷多个反射面 $\sigma^{(\varphi)}$ ($\varphi=0-2\pi$)，这里 $\sigma^{(0)}$ 代表 xz 反射面。

② 二维表示 Π, Δ, … 为假的二维表示，其实是两个互为复共轭的一维表示 IR 基的线性组合。如 Π_u 为 $\rho e^{i\varphi}$ 和 $\rho e^{-i\varphi}$，或为它们的线性组合。$\Sigma^\pm$ 中的 ± 代表 $\sigma^{(0)}=\pm1$。

③ "—"：代表该波函数不是 $\sigma^{(0)}$ 的本征函数。

表 8.3-15　T, $T_h=T\times\mathscr{C}_i$ 群

	$4C_3$	I	(C_2^x, C_2^y)	本 征 函 数
A_g	4	1		$x^2+y^2+z^2$
E_g	$e^{2\pi i/3}$	1		$(2z^2-x^2-y^2, \sqrt{3}(x^2-y^2))$
	$e^{-2\pi i/3}$	1		
T_g	0	1	$(1\ -1, -1\ 1, -1\ -1)$	(R_x, R_y, R_z), (yz, zx, xy)
A_u	4	-1		
E_u	$e^{2\pi i/3}$	-1		
	$e^{-2\pi i/3}$	-1		
T_u	0	-1	$(1\ -1, -1\ 1, -1\ -1)$	(x, y, z)

表 8.3-16 T_d 群

	C	$C(s)$	本征函数	$C(s)$	本征函数
	$6\sigma_d$	(C_2^z, C_2^x)	$T_d \supset D_2$ 分类基	S_4^z	$T_d \supset S_4$ 分类基
A_1	6	(1, 1)	F^{A_1}	1	F^{A_1}
A_2	-6	(1, 1)	F^{A_2}	-1	F^{A_2}
E	0	—	—	$(1, -1)$	$(2z^2-x^2-y^2,\ \sqrt{3}(x^2-y^2))$
T_1	-2	$((1,-1), (-1,1), (-1,-1))$	(R_x, R_y, R_z)	$(-i, i, 1)$	$\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}(R_x+iR_y), \sqrt{\frac{1}{2}}(R_x-iR_y), R_z\right)$
T_2	2	$((1,-1), (-1,1), (-1,-1))$	$(x, y, z), (yz, xz, xy)$	$(-i, i, -1)$	$\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}(x+iy), \sqrt{\frac{1}{2}}(x-iy), z\right)$

① $F^{A_1}=x^4+y^4+z^4$, $F^{A_2}=x^4(y^2-z^2)+y^4(z^2-x^2)+z^4(x^2-y^2)$, $R_x=x(y^2-z^2)$, x, y, z 轮换.

② "—": 代表不能用(C_2^z, C_2^x)的本征值来区分 $T_d \supset D_2$ 二维不可约基.

表 8.3-17 O, $O_h = O \times \mathscr{C}_i$ 群

	C		$C(s)$	本征函数	$C(s)$	本征函数
	$6C_2$	I	(C_2^z, C_2^x)	$O_h \supset D_2$ 分类基	C_4^z	$O_h \supset \mathscr{C}_4$ 分类基
A_{1g}	6	1	(1, 1)	F^{A_1}	1	F^{A_1}
A_{2g}	-6	1	(1, 1)	F^{A_2}	-1	F^{A_2}
E_g	0	1	—	—	$(1, -1)$	$(2z^2-x^2-y^2,\ \sqrt{3}(x^2-y^2))$
T_{1g}	-2	1	$((1\ -1), (-1\ 1), (-1\ -1))$	(R_x, R_y, R_z)	$(-i, i, 1)$	$\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}(R_x+iR_y), \sqrt{\frac{1}{2}}(R_x-iR_y), R_z\right)$
T_{2g}	2	1	$((1\ -1), (-1\ 1), (-1\ -1))$	(yz, xz, xy)	$(-i, i, -1)$	$\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}(yz+ixz), \sqrt{\frac{1}{2}}(yz-ixz), xy\right)$
A_{1u}	6	-1	(1 1)	$xyz \cdot F^{A_2}$	1	$xyz \cdot F^{A_2}$
A_{2u}	-6	-1	(1 1)	xyz	-1	xyz
E_u	0	-1	—	—	$(1, -1)$	$(xyz(2z^2-x^2-y^2),\ \sqrt{3}xyz(x^2-y^2))$
T_{1u}	-2	-1	$((1\ -1), (-1\ 1), (-1\ -1))$	(x, y, z)	$(-i, i, 1)$	$\left(-\sqrt{\frac{1}{2}}(x+iy), \sqrt{\frac{1}{2}}(x-iy), z\right)$
T_{2u}	2	-1	$((1\ -1), (-1\ 1), (-1\ -1))$	$(x(y^2-z^2), y(z^2-x^2), z(x^2-y^2))$	$(-i, i, -1)$	

① F^{A_1}, F^{A_2} 同表 8.3-16. "—": 意义同表 8.3-16.

常见点群的 CSCO-II

点群的 CSCO-II 由算符集$(C, C(s))$构成, $C(s)$ 为子群链 $G(s)$ 的 CSCO, 子群链 $G(s)$ 的选取视实际问题需要而定(见 § 3.19).

我们可以根据所选的群链 $G \supset G(s)$, 按第三章的方法求解$(C, C(s))$的本征方程而得到点群的 IR 基. 不过点群中更常碰到的情况是, 对点群 G 的每一个 IR 都已列出了以 x, y, z 的最低幂次构成的 IR 基. 因此问题可以倒过来做. 根据已经列出的 IR 基(见表 8.3), 反推出对应的 CSCO-II$(C, C(s))$. 知道了点群 G 的 CSCO-II 后, 可再用它来求出更复杂情形下(如 x, y, z 更高幂次的多项式, 多粒子体系的波函数等)的不可约基.

例如对轴对称群的二维表示 E, 一般都选(x, y)为基, 可以验证, (x, y)是 C_2^x 或 σ^y 的本征函数, 对应的本征值为$(1, -1)$

$$C_2^x\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\-y\end{pmatrix},\quad \sigma^y\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\\-y\end{pmatrix}. \tag{8-31}$$

如果我们采用在群 G 作用下变换性质和 x, y 一样的基作为不可约基，那么 C_2^x（或 σ^y）一个算符就构成了轴对称群的 $C(s)$（自然 C_2^x 或 σ^y 要属于群 G），所以轴对称群的 $C(s)$ 很简单

$$G=D_n,\ D_{nh},\ G(s)=\mathscr{C}_2,\ C(s)=C_2^x.$$

$$G=\mathscr{C}_{nv},\ D_{nd},\ G(s)=\mathscr{C}_s,\ C(s)=\sigma^y.$$

对 T_d 群，T_2 表示的三个 IR 基一般选为 x, y, z，而 x,y,z 是 (C_2^x, C_2^y) 的共同本征函数，对应于本征值 $(1, -1)$, $(-1, 1)$, $(-1, -1)$，因此 (C_2^x, C_2^y) 就是 T_2 表示的 $C(s)$. 根据表 8.3-1 可知 (C_2^x, C_2^y) 是 D_2 群的 CSCO-I，因此 x, y, z 是 $T_d\supset D_2$ 分类基. 在某些情况下，T_1, T_2 表示选复数基 $\frac{-1}{\sqrt{2}}(x+iy)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)$, z（即 Y_{11}, Y_{1-1}, Y_{10}）更为方便. 由 (8-23) 容易看出，它们是 S_4^z 的本征函数，对应的本征值为 $-i$, i, 1. 因此 S_4^z 一个算符就构成 $C(s)$，而 S_4^z 又是循回群 S_4 的类算符，因此 Y_{11}, Y_{1-1}, Y_{10} 是 $T_d\supset S_4$ 分类基.

§8.4 点群 G 的不可约矩阵和 $O_3\supset G$ 分类基

我们可以用 §3.13 的方法，在点群 G 的正则表示空间求出 CSCO-III 的本征矢量，从而得到点群的不可约矩阵. 不过由于点群问题比较简单，以 x, y, z 的低幂次多项式为基时，其 IR 基预先就已知道. 因此我们可以对点群的 IR 矩阵给出一些普遍公式而不必将每个点群的正则表示进行分解来求其 IR 矩阵.

1. 不可约矩阵

以极矢量 (x, y, z) 或轴矢量 (R_x, R_y, R_z) 为基时，三个二度轴 C_2^x, C_2^y, C_2^z 和三个反射面 σ^x, σ^y, σ^z 的矩阵表示可由以下式子简单给出：

$$C_2^x\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_x\\-A_y\\-A_z\end{pmatrix},\ C_2^y\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-A_x\\A_y\\-A_z\end{pmatrix},\ C_2^z\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-A_x\\-A_y\\A_z\end{pmatrix},\ \boldsymbol{A}\text{ 为极（或轴）矢量.}$$

$$\sigma^x\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}-A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix},\ \sigma^y\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}A_x\\-A_y\\A_z\end{pmatrix},\ \sigma^z\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\A_z\end{pmatrix}=\pm\begin{pmatrix}A_x\\A_y\\-A_z\end{pmatrix},\ \text{对}\genfrac{}{}{0pt}{}{\text{极}}{\text{轴}}\text{矢量 }\boldsymbol{A} \tag{8-32}$$

（注意 $C_2^x=C_2^{(0)}$, $C_2^y=C_2^{(90^\circ)}$, $\sigma^x=\sigma^{(90^\circ)}$, $\sigma^y=\sigma^{(0)}$, $\sigma^z=\sigma_h$）.

轴对称群不可约表示至多为二维，不可约基有以下几种

(1) $D^{(1)}$ 表示，以 (x, y) 为基.

由 (8-6) 式、(8-7) 式、(8-15) 式和 (8-23) 式得到以下不可约矩阵：

$$D^{(1)}(R_z(\varphi))=D^{(1)}(S_z(\varphi))=\begin{pmatrix}\cos\varphi & -\sin\varphi\\ \sin\varphi & \cos\varphi\end{pmatrix}, \tag{8-33a}$$

$$D^{(1)}(C_2^{(\varphi)})=D^{(1)}(\sigma^{(\varphi)})=\begin{pmatrix}\cos 2\varphi & \sin 2\varphi\\ \sin 2\varphi & -\cos 2\varphi\end{pmatrix}. \tag{8-33b}$$

(2) $D^{(2)}$ 表示，以 (R_x, R_y) 为基.

根据轴矢量和极矢量在转动下变换性质一样，在反射下变换性质相反[见 (8-32) 式]，由

(8-33)式得到

$$D^{(2)}(R_z(\varphi))=-D^{(2)}(S_z(\varphi))=D^{(1)}(R_z(\varphi)),$$
$$D^{(2)}(C_2^{(\varphi)})=-D^{(2)}(\sigma^{(\varphi)})=D^{(1)}(C_2^{(\varphi)}). \tag{8-34}$$

(3) $D^{(3)}$ 表示，以 $(R_y, -R_x)$ 为基.

$(R_y, -R_x)$ 荷载的 IR 记为 $D^{(3)}$. 若 $C(s)$ 取为 σ^y，则以轴矢量为基的二维表示的第一分量应当选为 R_y(因为 $\sigma^y R_y=R_y$, $\sigma^y R_x=-R_x$). 但第二分量原则上可选为 R_x 或 $-R_x$. 对某些群. 如 D_{2d}, $\mathscr{C}_{3v}$, $\mathscr{C}_{4v}$ 等，(x, y) 和 $(R_y, -R_x)$（或 (R_y, R_x)）属于同一不可约表示. 这时为了保证同一 IR 各分量之间相对位相一致，R_x 前的正负号就不能任意取，而只能取负号（证明见下面），因此我们一律取 $(R_y, -R_x)$ 为基.

利用 $D_{11}^{(3)}=D_{22}^{(2)}$, $D_{22}^{(3)}=-D_{11}^{(2)}$, $D_{ij}^{(3)}=-D_{ji}^{(2)}$, $(ij)=(12), (21)$，由(8-34)式、(8-33)式得到

$$D^{(3)}(R_z(\varphi))=-D^{(3)}(S_z(\varphi))=D^{(1)}(R_z(\varphi)),$$
$$-D^{(3)}(C_2^{(\varphi)})=D^{(3)}(\sigma^{(\varphi)})=D^{(1)}(\sigma^{(\varphi)}). \tag{8-35}$$

由(8-35)式知道，对 D_{2d}, $\mathscr{C}_{3v}$, $\mathscr{C}_{4v}$ 等群（这些群中没有 $C_2^{(\varphi)}$ 和 $S^z(\varphi)$），(x,y) 和 $(R_y, -R_x)$ 给出的 IR 矩阵完全一致，这就是我们取 $(R_y, -R_x)$ 而不取 (R_y, R_x) 作为 IR 基的道理.

(4) $D^{(4)}$ 表示，以 $(x^2-y^2, -2xy)$ 为基.

$$x^2-y^2=\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22}+Y_{2-2}),\quad -2xy=\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{22}-Y_{2-2}).$$

由(8-33)式可得出以 $(x^2-y^2, -2xy)$[1]为基时的不可约矩阵. 例如由(8-33a)式得

$$x'=x\cos\varphi+y\sin\varphi,\ y'=-x\sin\varphi+y\cos\varphi.$$

于是

$$\begin{pmatrix} x'^2-y'^2 \\ -2x'y' \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ \sin 2\varphi & \cos 2\varphi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x^2-y^2 \\ -2xy \end{pmatrix},$$

$$\therefore\quad D^{(4)}(R_z(\varphi))=D^{(4)}(S_z(\varphi))=\begin{pmatrix} \cos 2\varphi & \sin 2\varphi \\ -\sin 2\varphi & \cos 2\varphi \end{pmatrix}, \tag{8-36a}$$

$$D^{(4)}(C_2^{(\varphi)})=D^{(4)}(\sigma^{(\varphi)})=\begin{pmatrix} \cos 4\varphi & -\sin 4\varphi \\ -\sin 4\varphi & -\cos 4\varphi \end{pmatrix}. \tag{8-36b}$$

对于某些群，以上四种基可能有两种或三种是属于同一不可约表示的. 例如见表 8.3 中分表 3, 4, 5, 6, 11.

令(8-33)式—(8-36)式中的 φ 等于由群 G 所决定的那些特定值，就可得到二维表示不可约矩阵. 例如根据表 8.3-5 中的附图及(8-33)式，得到 $\mathscr{C}_{3v}$ 群 E 表示[以 (x, y) 或 $(x^2-y^2, -2xy)$ 为基]的 IR 矩阵

$$D^E(e)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},\quad D^{(E)}(C^z(120^\circ))=\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix},$$
$$D^E(C^z(240^\circ))=\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix},$$
$$D^E(\sigma_y)=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},\ D^{(E)}(\sigma^{(120^\circ)})=\begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix},$$
$$D^E(\sigma^{(240^\circ)})=\begin{pmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{pmatrix}. \tag{8-37}$$

1) 这里取 $(x^2-y^2, -2xy)$ 为基而不取 $(x^2-y^2, 2xy)$ 为基的原因与前一小段相同.

(8-37)式和置换群 S_3 的不可约矩阵元[(3-91)式]完全一致.

如果我们的目的是为了求不可约基，则只需知道构成 CSCO-II 的那些群元的不可约矩阵.

根据 $x, y, z(yz, xz, xy)$ 在 O 群操作下的变换性质，立即可找出 O 群 $T_1(T_2)$ 表示的矩阵. 例如从图 8.2-4 可以得到表 8.4

表 8.4 x, y, z 在 O 群某些操作下的变换性

R	C_2^{xy}	$C_2^{x\bar{y}}$	C_2^{xz}	$C_2^{x\bar{z}}$	C_2^{yz}	$C_2^{y\bar{z}}$	C_4^z
$R(xyz)$	$yx\bar{z}$	$\bar{y}\bar{x}\bar{z}$	$z\bar{y}x$	$\bar{z}\bar{y}\bar{x}$	$\bar{x}zy$	$\bar{x}\bar{z}\bar{y}$	$\bar{y}xz$

由上表可知

$$C_4^z\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-y\\x\\z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}$$

注意，这里 x, y, z 是作为一个点的坐标的，所以上式右方的矩阵就是 C_4^z 的 T_1 表示矩阵(比较(2-59)式)：

$$D^{T_1}(C_4^z)=\begin{pmatrix}0&-1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}.$$

由表 8.4 又可得到

$$C_4^z\begin{pmatrix}yz\\xz\\xy\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}xz\\-yz\\-yx\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}yz\\xz\\xy\end{pmatrix},$$

于是

$$D^{T_2}(C_4^z)=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}.$$

类似地可得到(8-38a)式(和 McWeeny 书上的结果一致).

$$D^{T_i}(C_2^{xy})=(-1)^i\begin{pmatrix}0&-1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},\ D^{T_i}(C_2^{x\bar{y}})=(-1)^i\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},$$

$$D^{T_i}(C_2^{xz})=(-1)^i\begin{pmatrix}0&0&-1\\0&1&0\\-1&0&0\end{pmatrix},\ D^{T_i}(C_2^{x\bar{z}})=(-1)^i\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix},\tag{8-38a}$$

$$D^{T_i}(C_2^{yz})=(-1)^i\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&-1\\0&-1&0\end{pmatrix},\ D^{T_i}(C_2^{y\bar{z}})=(-1)^i\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},$$

$$D^{T_i}(C_4^z)=(-1)^i\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}.\quad \begin{array}{l}i=1,\ O\text{ 群不可约基为}(x,\ y,\ z)\\ i=2,\ O\text{ 群不可约基为}(yz,\ xz,\ xy).\end{array}$$

由表 8.3-16 所给的不可约基并利用 (8-15) 式、(8-23)式，可得到 T_d 群的六个反射面 σ^{ij} 和 S_4^z 的不可约矩阵，它仍由(8-38a)式表出，只需令(8-38a)式中 $C_2^{ij} \to \sigma^{ij}$, $ij=xy, x\bar{y}, yz, y\bar{z}, xz, x\bar{z}$, $C_4^z \to \bar{S}_4^z$. 注意(x, y, z)属于 O 群 T_1 表示，属于 T_d 群 T_2 表示. 而(yz, xz, xy)属于 O 群的 T_2 表示，属于 T_d 群的 T_1 表示.

在后面的应用中，还常需要以下 T_d 群和 O 群 E 表示的不可约矩阵：

$$T_d \text{ 群} \quad D^E(\sigma^{x\bar{z}}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad O \text{ 群} \quad D^E(C_2^{x\bar{z}}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \tag{8-38b}$$

利用

$$D^{T_{ig}} = D^{T_i}, \; D^{T_{iu}} = -D^{T_i}, \; i=1, 2, \; D^{E_g} = D^E, \; D^{E_u} = -D^E, \tag{8-39}$$

就可从 O 群的不可约矩阵(8-38)式直接得到 O_h 群的不可约矩阵.

2. 不可约基

点群 $G \supset G(s)$ 分类基 $\psi_\varkappa^{(\mu)}$ 满足本征方程

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \end{pmatrix} \psi_\varkappa^{(\mu)} = \begin{pmatrix} \mu \\ \varkappa \end{pmatrix} \psi_\varkappa^{(\mu)}. \tag{8-40}$$

根据 § 3.13 的讨论，对二维以上的表示，我们只需求出 μ 表示的某一分量 $\varkappa$ 的解 $\psi_\varkappa^\mu$. 选取合适的群操作 T, 利用上节给出的点群的不可约矩阵 $D(T)$ 就可由下式求出其余分量的解

$$\psi_{\varkappa'}^{(\mu)} = \frac{1}{D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(T)} [T - D_{\varkappa\varkappa}^{(\mu)}(T)] \psi_\varkappa^{(\mu)}. \tag{8-41}$$

对轴对称群，T 可选为 $C_2^{(\varphi)}$ 或 $\sigma^{(\varphi)}$, 只要 $D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(C_2^{(\varphi)})$ $(D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(\sigma^{(\varphi)}))$ 不为零，$C_2^{(\varphi)}(\sigma^{(\varphi)})$ 的选取可以随便.

由表 8.3-16 (表 8.8-17) 看到，$O \supset D_2 (T_d \supset D_2)$ 分类基 T_i 表示的第三分量也是 $C_4^z(S_4^z)$ 的本征函数. 因此对 O 群，我们取 $(C, C(s)) = (6C_2, C_4^z)$; 对 T_d 群取 $(C, C(s)) = (6\sigma, S_4^z)$. 先由(8-40)式解出 E 表示的第一分量和 T_i 表示的第三分量，再利用(8-41)式(或其具体化即下面的(8-42)式)就可求得 $O \supset C_4 (T_d \supset S_4)$分类基 E 表示的第二分量和 $O \supset D_2 (T_d \supset D_2)$ 分类基 T_i 表示的一、二分量的解 (编号次序见表 8.3-16 和表 8.3-17). 利用(8-38)式给出的 IR 矩阵，(8-41)可具体地写成：

T_d 群	O 群	
$T_d \supset S_4^z$: $\psi_2^E = \sqrt{\frac{1}{3}} [2\sigma^{x\bar{z}} + 1] \psi_1^E$,	$O \supset C_4^z$: $\psi_2^E = \sqrt{\frac{1}{3}} [2C_2^{x\bar{z}} + 1] \psi_1^E$,	(8-42a)
$T_d \supset D_2$: $\psi_1^{T_i} = (-1)^i \sigma^{x\bar{z}} \psi_3^{T_i}$,	$O \supset D_2$: $\psi_1^{T_i} = (-1)^i C_2^{x\bar{z}} \psi_3^{T_i}$, $i=1, 2$,	(8-42b)
$\psi_2^{T_i} = (-1)^i \sigma^{y\bar{z}} \psi_3^{T_i}$,	$\psi_2^{T_i} = (-1)^i C_2^{y\bar{z}} \psi_3^{T_i}$.	

3. $O_3 \supset G \supset G(s)$ 分类基

点群 G 是三维正交群 O_3 的子群，用 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}$ 标志一个 $O_3 \supset G \supset G(s)$ 分类基，它可用 $O_3 \supset O_2$ 分类基 $r^l Y_{lm}$ 展开，r 为不变量，以下略去.

$$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)} = \sum_{m=-l}^{l} a_{\varkappa,m}^\mu Y_{lm}. \tag{8-43}$$

式中的展开系数 $a^{\mu}_{\varkappa m}$ 满足本征方程

$$\sum_{m'}\left[\left\langle Y_{lm}\left|\begin{matrix}C\\C(s)\end{matrix}\right|Y_{lm'}\right\rangle-\begin{pmatrix}\mu\\\varkappa\end{pmatrix}\delta_{mm'}\right]a^{\mu}_{\varkappa m'}=0. \tag{8-44}$$

由上式可求出 $a^{\mu}_{\varkappa,m'}$.

点群中更常用的是用 x, y, z 的齐次式来表示 $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基 $\phi^{(l)}_{\mu\varkappa}$:

$$\phi^{(l)}_{\mu\varkappa}=\sum_{\alpha,\beta=0,1}^{l}a^{\mu}_{\varkappa,\alpha\beta}x^{\alpha}y^{\beta}z^{l-\alpha-\beta}. \tag{8-45}$$

求和时要求 $\alpha+\beta\leqslant l$. 若 $C=\sum_i R_i$, R_i 为群元,利用

$$C(x^{\alpha}y^{\beta}z^{l-\alpha-\beta})=\sum_i(R_ix)^{\alpha}(R_iy)^{\beta}(R_iz)^{l-\alpha-\beta}, \tag{8-46}$$

以及点群 G 的不可约矩阵元[见(8-6)式,(8-7)式,(8-15)式,(8-23)式,(8-38)式]就可求出 C, $C(s)$ 在基 $|\alpha\beta\rangle=x^{\alpha}y^{\beta}z^{l-\alpha-\beta}$ 上的表示矩阵.而由下式就可求出(8-45)式中的展开系数 $a^{\mu}_{\varkappa,\alpha\beta}$

$$\sum_{\gamma\delta}\left[\left\langle\alpha\beta\left|\begin{matrix}C\\C(s)\end{matrix}\right|\gamma\delta\right\rangle-\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}\begin{pmatrix}\mu\\\varkappa\end{pmatrix}\right]a^{\mu}_{\varkappa,\gamma\delta}=0. \tag{8-47}$$

下面举三个例子来说明如何求 $O_3\supset G\supset G(s)$ IR 基.

(1) $\mathscr{C}_n$ 群

$\mathscr{C}_n$ 群是阿贝尔群,它的 CSCO-I 为

$$C=C_n=R_z(2\pi/n)=\exp(-2\pi iJ_z/n). \tag{8-48a}$$

在极坐标中很容易求出 C 的本征函数

$$\begin{aligned}&C\phi^{(\mu)}=\lambda^{\mu}\phi^{(\mu)},\ C=\exp\left(-\frac{2\pi}{n}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\\&\phi^{(\mu)}=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\mu\varphi},\ \lambda^{\mu}=e^{-2\pi\mu i/n},\ \mu=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots,\ \pm\left[\frac{n}{2}\right].\end{aligned} \tag{8-48b}$$

$\left[\frac{n}{2}\right]$ 代表取 $\frac{n}{2}$ 值的整数. C_n 群的所有不可约表示都是一维的,它的不可约基为复数,使用上不方便. 通常将本征值互为复共轭的两个解重新组合成两个实数解,并仍用 E 标志这个二维(可约)表示

$$\phi^E_1=\cos\mu\varphi,\ \phi^E_2=\sin\mu\varphi. \tag{8-48c}$$

例如 $\mu=1$, $(\phi^E_1, \phi^E_2)=(x, y)$. $\mu=2$, $(\phi^E_1, \phi^E_2)=(x^2-y^2, -2xy)$, $\cdots$.

(2) D_n, D_{nh} 群

$D_n(D_{nh})$ 群的 CSCO-II 中都包含以下两个算符

$$\begin{aligned}C&=e^{-2\pi iJ_z/n}+e^{2\pi iJ_z/n}=2\cos(2\pi J_z/n),\\C(s)&=C^x_2.\end{aligned} \tag{8-49a}$$

在极坐标中, C^x_2 的作用使极角 $\varphi\to-\varphi$, 因此

$$\begin{aligned}&\begin{pmatrix}C\\C(s)\end{pmatrix}\cos\mu\varphi=\begin{pmatrix}2\cos(2\pi\mu/n)\\1\end{pmatrix}\cos\mu\varphi,\\&\begin{pmatrix}C\\C(s)\end{pmatrix}\sin\mu\varphi=\begin{pmatrix}2\cos(2\pi\mu/n)\\-1\end{pmatrix}\sin\mu\varphi,\end{aligned}\quad \mu=1,\ 2,\ 3,\ \cdots\left[\frac{n}{2}\right]. \tag{8-49b}$$

上式表明，$(\cos\mu\varphi,\ \pm\sin\mu\varphi)$ 构成 $D_n(D_{nh})$ 群 E 表示的两个不可约基. $\sin\mu\varphi$ 前的正负号由相对位相决定(见本节第一小节).

由此可见 $D_n(D_{nh})$ 群的一个二维表示正好约化成 $\mathscr{C}_n$ 群的两个互为复共轭的不可约表示. 因此我们也可反过来，先求出 $\mathscr{C}_n$ 群的 IR 基，然后分别取其实部和虚部，就可构成 $D_n(D_{nh})$ 群的二维 IR 基.

(3) O_h 群

考虑 x, y, z 的二次式，O_h 群的 CSCO-II 为 $(6C_2,\ I,\ C_4^z)$:

$$6C_2 = C_2^{xy}+C_2^{x\bar{y}}+C_2^{xz}+C_2^{x\bar{z}}+C_2^{yz}+C_2^{y\bar{z}}. \tag{8-50}$$

由(8-38a)式、(8-46)式容易求出

$$(6C_2)xy = 2xy^{1)},\quad C_4^z xy = -xy.$$

和表 8.3-17 给出的 CSCO-II 的本征值相对照，知道 xy 为 T_{2g} 表示的第三分量，对 x, y, z 进行轮换可以得到另外两个分量

$$\phi_1^{T_{2g}} = yz = \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21}+Y_{2-1})^{2)},\quad \phi_2^{T_{2g}} = zx = -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21}-Y_{2-1}),$$
$$\phi_3^{T_{2g}} = xy = \frac{-i}{\sqrt{2}}(Y_{22}-Y_{2-2}). \tag{8-51}$$

根据

$$(6C_2)x^2 = (6C_2)y^2 = (6C_2)z^2 = 2(x^2+y^2+z^2),$$
$$C_4^z x^2 = y^2,\quad C_4^z y^2 = x^2,\quad C_4^z z^2 = z^2.$$

可解得

$$\phi^{A_{1g}} = (x^2+y^2+z^2) = Y_{00},\quad \phi_1^{E_g} = (2z^2-x^2-y^2) = Y_{20}. \tag{8-52a}$$

由(8-42)式、(8-38a)式得

$$\phi_2^{E_g} = \sqrt{\frac{1}{3}}\,(2C_2^{xz}+1)\,(2z^2-x^2-y^2) = \sqrt{3}\,(x^2-y^2) = \sqrt{\frac{1}{2}}(Y_{22}+Y_{2-2}). \tag{8-52b}$$

用类似方法可求出表 8.3-17 中列出的以 x, y, z 的更高次多项式组成的本征函数.

表 8.3-1 至 8.3-17 给出了常见点群的 CSCO-II 及其本征函数. G_1 和 $G_1\times G_2$ 群的 CSCO-II 列在同一个表. § 8.3 关于 G_1 群和 $G_1\times G_2$ 群的 CSCO-I 的关系的说明，对 CSCO-II 仍然适用. 例如由表 8.3-5 可得到以下关于 $\mathscr{C}_{3v}$ 群的表.

表 8.4 $\mathscr{C}_{3v}$ 群的 CSCO-II 及其本征函数

	$3\sigma_v$	σ^y	
A_1	3		$x^2+y^2,\ z^2$
A_2	-3		$z,\ R_z$
E	0	$(1,\ -1)$	$(x,\ y),\ (R_y,\ -R_x),\ (xz,\ yz),\ (x^2-y^2,\ -2xy)$

习　　题

1．利用(8-33)式求出 $\mathscr{C}_{4v}$ 群 E 表示的不可约矩阵，并与 § 3.11 习题 2 作比较。

1) $(6C_2)xy \neq [(6C_2)x][(6C_2)y]$.

2) 这里略去了归一因子及 r^2 因子。

§8.5 点群 CG 系数

1. 点群的 CG 序列

点群 G 的两个 $IR(\mu_1)$ 和 (μ_2) 的直乘积中包含 G 的那些 IR 称为点群的 CG 序列问题

$$D^{(\mu_1)}\times D^{(\mu_2)}=\sum_{\mu}\oplus(\mu_1\mu_2\mu)D^{(\mu)}。\tag{8-53a}$$

$(\mu_1\mu_2\mu)$ 由(3-274)式给出. Koster 书上给出了 32 种晶体点群的 CG 序列. 例如表 8.5-1 给出 $T_d(O)$ 群的 CG 序列.

表 8.5-1 T_d, O 群 CG 序列[1]

	A_1	A_2	E	T_1	T_2
A_1	A_1	A_2	E	T_1	T_2
A_2		A_1	E	T_2	T_1
E			A_1+A_2+E	T_1+T_2	T_1+T_2
T_1				$A_1+E+T_1+T_2$	$A_2+E+T_1+T_2$
T_2					$A_1+E+T_1+T_2$

1) 由于 $(\mu_1\mu_2\mu)=(\mu_2\mu_1\mu)$，所以表中只列出右上角的值.

对于特征标全为实数的群，$(\mu_1\mu_2\mu)$ 满足对称性(3-276)式，若 A 为恒等表示，则显然有

$$D^{(\mu)}\times D^{A}=D^{(\mu)}.\tag{8-53b}$$

2. 点群的 CG 系数

若 $\varphi_{\varkappa_1}^{(\mu_1)}(x_1)$ 和 $\varphi_{\varkappa_2}^{(\mu_2)}(x_2)$ 为同一点群 G 的两个 IR 基，分别属于粒子 1 和 2. 把乘积基 $\varphi_{\varkappa_1}^{(\mu_1)}(x_1)$ 和 $\varphi_{\varkappa_2}^{(\mu_2)}(x_2)$ 的积线性组合成群 G 的 IR 基 $\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}(x_1, x_2)$ 的组合系数就是点群的 CG 系数

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}(x_1,\ x_2)=\sum_{\varkappa_1\varkappa_2}C_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}^{(\mu)\tau\varkappa}\varphi_{\varkappa_1}^{(\mu_1)}(x_1)\varphi_{\varkappa_2}^{(\mu_2)}(x_2).\tag{8-54}$$

对 32 种晶体点群，多重性指标 τ 是多余的，只有对双点群 (double point group)[1]才出现多重性问题，见 Koster(1963) 的著作.

点群的 CG 系数仍可用本征函数法 (3-293) 式方便地算得，下面以 T_d 群 $T_2\times T_2$ 为例，说明(3-293)式在计算点群 CG 系数上的应用.

由(3-294)式可将 T_d 群 CSCO-II$(C,\ S_4^z)$在非耦合表象中的矩阵元表为$(C=6\sigma)$

$$\begin{aligned}&\langle i'j'|C|ij\rangle=\sum_{\alpha}D_{i'i}^{(T_2)}(\sigma^{\alpha})D_{j'j}^{(T_2)}(\sigma^{\alpha}),\\&\langle ii|C|jj\rangle=\langle ij|C|ji\rangle=\sum_{\alpha}[D_{ij}^{(T_2)}(\sigma^{\alpha})]^2,\end{aligned}\tag{8-55a}$$

式中对 $\alpha=(12),\ (13),\ (14),\ (23),\ (24),\ (34)$ 求和.

$$\langle i'j'|S_4|ij\rangle=D_{i'i}^{(T_2)}(S_4^z)D_{j'j}^{(T_2)}(S_4^z).\tag{8-55b}$$

利用 IR 矩阵元(8-38a)式，由(8-55a)式、(8-55b)式可求出 C 和 S_4^z 在非耦合表象中的矩阵表示. 这些矩阵是准对角化的，它们的部分子矩阵为:

---

1) 双点群和点群的关系，同 SO_3 群的覆盖群和 SO_3 群的关系一样.

$$\begin{array}{c} |11\rangle\,|22\rangle\,|33\rangle \\ C=\begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}, \end{array} \quad \begin{array}{c} |11\rangle\,|22\rangle\,|33\rangle \\ S_4^z=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{array} \tag{8-55c}$$

$$\begin{array}{c} |12\rangle\,|21\rangle \\ C=\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \end{array} \quad \begin{array}{c} |12\rangle\,|21\rangle \\ S_4^z=\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \end{array} \tag{8-55d}$$

将(8-55c)式的两个矩阵同时对角化，并利用表 8.3-16 给出的 $(C, C(s))$ 的本征值和传统标志的对照关系得到以下三个解

$$\begin{gathered} \Psi^{A_1}=\sqrt{\frac{1}{3}}(|11\rangle+|22\rangle+|33\rangle), \\ \Psi_1^E=\sqrt{\frac{1}{6}}(-|11\rangle-|22\rangle+2|33\rangle), \quad \Psi_2^E=\sqrt{\frac{1}{2}}(|11\rangle-|22\rangle), \end{gathered} \tag{8-56a}$$

但是光从本征方程不能决定 E 表示 1，2 分量之间的相对位相. 因此更合理的方法是先由(8-55c)解出例如 Ψ_1^E，然后再利用(8-42)式及(8-38a)式求出 Ψ_2^E，即

$$\Psi_2^E=\sqrt{\frac{1}{3}}(2\sigma^{xz}+1)\sqrt{\frac{1}{6}}(-|11\rangle-|22\rangle+2|33\rangle)=\sqrt{\frac{1}{2}}(|11\rangle-|22\rangle).$$

将(8-55d)式的两个矩阵同时对角化，类似地得到

$$\Psi_3^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|12\rangle-|21\rangle), \quad \Psi_3^{T_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|12\rangle+|21\rangle). \tag{8-56b}$$

对 1, 2, 3 进行轮换，可以得到其它两个解.

$$\begin{gathered} \Psi_1^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|23\rangle-|32\rangle), \quad \Psi_1^{T_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|23\rangle+|32\rangle), \\ \Psi_2^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|31\rangle-|13\rangle), \quad \Psi_2^{T_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}(|31\rangle+|13\rangle). \end{gathered} \tag{8-56c}$$

(8-56)式给出的 T_d 群 $T_2\times T_2$ CG 系数和 Koster(1963) 表 83 一致.

根据定义式(8-54)，点群 CG 系数一般是用来耦合两个粒子的 IR 基的. 我们也可利用点群 CG 系数把同一个粒子的两个 IR 基耦合成该粒子的另一个 IR 基. 换言之，若令(8-54)式中 $x_1=x_2=x$，如果该式不为零，则它是群 G 的不归一化的 IR 基:

$$\psi_\varkappa^{(\mu)}(x)=\sum_{\varkappa_1\varkappa_2} C_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}^{\mu,\varkappa}\varphi_{\varkappa_1}^{(\mu_1)}(x)\varphi_{\varkappa_2}^{(\mu_2)}(x), \tag{8-57a}$$

例如由(8-56)式得到(注意 $|1\rangle=x$，$|2\rangle=y$，$|3\rangle=z$):

$$\begin{gathered} \psi^{A_1}=\sqrt{\frac{1}{3}}(x^2+y^2+z^2), \quad \psi_1^E=\sqrt{\frac{1}{6}}(2z^2-x^2-y^2), \quad \psi_2^E=\sqrt{\frac{1}{2}}(x^2-y^2), \\ \psi_3^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(xy-yx)=0, \; \psi_3^{T_2}=\sqrt{2}\,xy \text{ 等}. \end{gathered} \tag{8-57b}$$

除了归一系数外，和表 8.3-16 一致.

由此可见，知道了点群 CG 系数，就可不用解本征方程(8-47)式，而利用(8-57a)式由 l 较低的 $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基 $\psi_{\mu m}^l$ 构造出 l 较高的同一种分类基 $\psi_{\mu m}^{l'}$.

32 种晶体点群的 CG 系数表见 Koster (1963). Butler (1980) 给出了所有可能的点群

群链的 CG 系数表和拉卡系数表.

§8.6 分子轨道理论

1. 分子是一个多电子系统, 描述分子运动的一个较成功的理论是所谓"分子轨道理论". 该理论的精神是: 假定一个由 n 个原子组成的分子, 先从该分子中剥去几个 (例如 n 个) 电子, 然后考虑单电子在此分子骨架(它是一个 n 价离子)上的运动. 单电子在这种分子骨架上的一种可能的运动状态, 称为一个分子轨道 (Feynman).



图 8.6

设 n 个原子核的矢径为 $\boldsymbol{R}_i$, $i=1, 2, \cdots n$; 电子的矢径为 $\boldsymbol{r}$, 如图 8.6 所示. 令 $\phi^{(l)}_{\mu_s\varkappa_s}$ 为 $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基的原子轨道波函数(单电子波函数). 将分子轨道取为 n 个原子波函数的线性组合

$$\Psi=\sum_{i=1}^{n}\sum_{\varkappa_s}b_i\phi^l_{\mu_s\varkappa_s}(i),\ \phi^l_{\mu_s\varkappa_s}(i)=\phi^l_{\mu_s\varkappa_s}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i),\tag{8–58}$$

称为分子轨道的原子轨道线性组合近似. (8–58)式表明, 电子不是定域于某一个原子核, 而是属于所有 n 个原子核的.

若分子的对称群为点群 G, 则分子轨道(8–58)式必须是点群 G 的不可约基$(\mu)\varkappa$.

$$\psi^{(\mu)\tau}_{\varkappa}=\sum_{\varkappa_s i}b^{(\mu)\tau}_{\varkappa,\varkappa_s i}\phi^l_{\mu_s\varkappa_s}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i),\tag{8–59}$$

式中 τ 为多重性指标. (8–59) 式称为对称性匹配波函数, 通常记为 SALC (Symmetry Adapted Linear Combination) 波函数, 我们称它为单电子 SALC 波函数. 这一问题在 §8.7 讨论.

2. SALC 波函数(8–59)式还不是分子轨道波函数, 我们要进一步考虑各原子轨道间的相互作用, 也就是说, 将单电子哈密顿 H 在基(8–59)上对角化.

我们将(8–59)式的 $\psi^{(\mu)}_{\varkappa}$ 线性组合成能量为 E 的分子轨道波函数

$$\psi^{(\mu)}_{\varkappa}(E)=\sum_{\tau}a_{E,\tau}\psi^{(\mu)\tau}_{\varkappa}.\tag{8-60a}$$

由于(3–320)式, 现在只需在同一 $IR(\mu)$ 内将哈密顿 H 对角化, 展开系数 $a_{E,\tau}$ 满足本征方程

$$\sum_{\tau'}\left[\langle\psi^{(\mu)\tau}|H|\psi^{(\mu)\tau'}\rangle-\delta_{\tau\tau'}E\right]a_{E,\tau'}=0,\tag{8–60b}$$

$$\langle\psi^{(\mu)\tau}|H|\psi^{(\mu)\tau'}\rangle=\langle\psi^{(\mu)\tau}_{\varkappa}|H|\psi^{(\mu)\tau'}_{\varkappa}\rangle,\tag{8-60c}$$

(8–60c)式中矩阵元的值和量子数 $\varkappa$ 无关.

本征方程(8–60b)式的阶数等于 $IR(\mu)$ 出现的次数. 因此当 $IR(\mu)$ 只出现一次时, 从对称性要求得到的 SALC 波函数(8–59)式也就是哈密顿 H 的本征函数.

3. 很多化合物 (如单核络合物) 的中心有一个金属原子, 周围有一些等价原子 (称为配位体). 这时第一步先将周围原子轨道线性组合成 $G\supset G(s)$ 分类基(即 SALC 波函数). 第二步求出中心原子的 $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基. 第三步考虑各原子轨道之间相互作用, 将属于群 G 同一 IR 的周围原子的 SALC 波函数 (可能不止一个) 和中心原子的波函数进一步混合, 通过解久期方程, 得到分子轨道. 处在某一分子轨道上的电子既属于周围原子, 也属于中心原子.

4．求出了分子轨道后，就可按分子轨道能级次序，将原先被剥去的 n 个电子依次填入，属于点群 G 的 $IR(\mu)$ 的一条能级上至多可以填 $2h_\mu$ 个电子，h_μ 为点群 $IR(\mu)$ 的维数，因子 2 来自电子自旋可以有朝上或朝下两种可能．分子轨道的一种填充方法称为一个组态(configuration)．填满最低分子轨道的组态称为*基态组态*．其它组态称为*激发组态*．每一组态可能对应不止一个 n-粒子乘积波函数(见 § 9.6～§ 9.8)．

5．把这些 n-粒子乘积波函数线性组合成 $G\supset G(s)$ 分类基（称为多电子 SALC）波函数）$\Psi_\varkappa^{(\mu)\beta}$，$\beta$ 为其它量子数．这样就构成一个近似的分子波函数，这相当于原子核物理中的极端单粒子模型．

6．进一步考虑电子之间的互相作用，把哈密顿在具有同一点群对称性 $(\mu)\varkappa$，而 β，c 取各种值的所有态 $\Psi_\varkappa^{(\mu)\beta,c}$ 上的表示矩阵对角化(c 为标志不同组态的附加指标)，找到一个更好的近似波函数．这相当于原子或原子核物理中考虑组态相互作用．

由此看出，分子轨道理论和原子、原子核物理中的壳层理论十分相近，故可称为*分子壳模型理论*．有关上述(4)、(5)两点将在 § 9.6～§ 9.10 讨论．

§ 8.7　单电子 SALC 波函数

(1) 先考虑所有原子轨道都是 s(即 $l=0$)轨道 φ，设 S 为群 G 的任一元素，由(2.58)式得

$$\begin{aligned}S\varphi(i)&=S\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i)=\varphi(S^{-1}\boldsymbol{r}-R_i)=\varphi(S^{-1}(\boldsymbol{r}-SR_i))\\&=\varphi(\boldsymbol{r}-S\boldsymbol{R}_i)=\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_j)=\varphi(j),\end{aligned}\tag{8-61a}$$

式中利用了 S 轨道的特性 $\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i)=\varphi(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i|)$，即它只和 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i$ 的长度有关．而 $\boldsymbol{R}_j=S\boldsymbol{R}_i$ 为顶点 i 的矢径经操作 S 作用后变到的一个新的矢径，它属于顶点 j．由(8-61a)式看到，对 s 态原子轨道 $\varphi(i)$，它在群 G 操作下，象顶点一样变换．例如图 8.6-1 中，$\varphi(2)$ 在反射面 $\sigma^{(1)}$ 作用下变到 $\varphi(3)$，

$$\begin{aligned}\sigma^{(1)}\varphi(2)&=\sigma^{(1)}\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_2)=\varphi(\boldsymbol{r}'-R_2)\\&=\varphi(\sigma^{(1)}(\boldsymbol{r}-\sigma^{(1)}\boldsymbol{R}_2))=\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_3)=\varphi(3).\end{aligned}\tag{8-61b}$$

假定在操作 S 作用下，顶点 i 变到顶点 j，令

$$D_{ki}(S)=\delta_{kj},\tag{8-62a}$$

于是

$$S\varphi(i)=\sum_j D_{ji}(S)\varphi(j).\tag{8-62b}$$

由于现在各原子轨道之间有重迭，$\{\varphi(i)\}$ 并不构成正交系

$$g_{ij}=\langle\varphi(i)|\varphi(j)\rangle\neq\delta_{ij}.\tag{8-63}$$

量子化学中将重迭积分（即度规张量）g_{ij} 记为 S_{ij}．只有当原子 i 和原子 j 相距无穷远时，重迭积分 g_{ij} 才等于 δ_{ij}．根据(2-15)式，这时形式上要引入 dual 基$\{\bar{\varphi}(i)\}$．(8-62)式中的 $D_{ji}(S)$ 表为

$$D_{ji}(S)=\langle\bar{\varphi}(j)|S|\varphi(i)\rangle.\tag{8-64}$$

利用点群和置换群的子群之间的同构关系（例如对 $\mathscr{C}_{6v}$ 群见 (3-21) 式，对 T_d 和 O 群见表 8.2-2 和表 8.2-3)，很容易求出 $D_{ji}(S)$，详见后面例子．

现在 $\{\varphi(i)\}$ 不是正交归一基．根据(2-121a)式，一般说它荷载的不是幺正表示．但

(8-62a)式或(8-64)式给出的表示显然仍为幺正表示：

$$D_{ij}(S^{-1})=D_{ji}(S)=D_{ij}^{\dagger}(S).$$

在$\{\varphi(i)\}$表象中将点群G的CSCO-II对角化，就可将$\varphi(i)$线性组合成G的IR基

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=\sum_{i}u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}\varphi(i). \qquad (8-65)$$

展开系数$u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$满足本征方程

$$\sum_{i}\left[\left\langle\bar{\varphi}(j)\left|\begin{matrix}C\\C(s)\end{matrix}\right|\varphi(i)\right\rangle-\begin{pmatrix}\mu\\\varkappa\end{pmatrix}\delta_{ij}\right]u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}=0. \qquad (8-66)$$

由(2-133a)式和(2-136b)式得到$u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$满足的正交归一完备条件：

$$\sum_{ij}u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau *}g_{ij}u_{\varkappa',j}^{(\mu')\tau'}=\delta_{\mu\mu'}\delta_{\tau\tau'}\delta_{\varkappa\varkappa'}, \qquad (8-67a)$$

$$\sum_{\mu\tau\varkappa}u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau *}g_{ij}u_{\varkappa,l}^{(\mu)\tau}=\delta_{jl}. \qquad (8-67b)$$

假定各原子轨道之间的重迭可以忽略，即假定

$$\mathring{g}_{ij}=\langle\mathring{\varphi}(i)\,|\,\mathring{\varphi}(j)\rangle=\delta_{ij}.$$

这时群G的SALC波函数为

$$\mathring{\psi}_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=\sum_{i}a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}\mathring{\varphi}(i). \qquad (8-68)$$

$a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$为幺正矩阵．因为$a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$仍满足本征方程(8-66)式，所以$u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$和$a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$之间只差一个常数倍

$$u_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}=N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}. \qquad (8-69)$$

由归一条件得

$$N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=\Big(\sum_{ij}a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau *}g_{ij}a_{\varkappa,j}^{(\mu)\tau}\Big)^{-1/2}. \qquad (8-70)$$

于是

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}\sum_{i}a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}\varphi(i). \qquad (8-71a)$$

由于$a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$为幺正，所以

$$\varphi(i)=\sum_{(\mu)\tau\varkappa}\big(a_{\varkappa,i}^{*(\mu)\tau}/N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}\big)\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}. \qquad (8-72)$$

和(2-137a)式比较，得

$$v_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}=\big(a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}\big)^{*}/N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}. \qquad (8-73a)$$

由(2-134)式得

$$v_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}=\sum_{j}g_{ij}u_{\varkappa j}^{(\mu)\tau}=\sum_{j}g_{ij}N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}a_{\varkappa j}^{(\mu)\tau}. \qquad (8-73b)$$

为简便起见以下均假定$g_{ij}=\delta_{ij}$，即令

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=\sum_{i}a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}\varphi(i). \qquad (8-71b)$$

倘若要回到非正交基，只需将上式右边乘以$N_{\varkappa}^{(\mu)\tau}$就立即得到所需的SALC波函数(8-71a)式．

由于在点群G操作下顶点置换所构成的置换群的子群和点群G同构，因此完全可利用求置换群IR的方法来求SALC波函数(8-71a)式．

例1　利用$\mathscr{C}_{3v}$群和置换群S_3的同构关系(1-15)式，由(3-82)式、(3-90)式立刻可写出$3\sigma=\sigma^{(1)}+\sigma^{(2)}+\sigma^{(3)}$和$\sigma^{y}=\sigma^{(1)}$的本征函数，即$\mathscr{C}_{3v}\supset\mathscr{C}_{s}$分类基：

$$\psi^{A_1}=\sqrt{\frac{1}{3}}[\varphi(1)+\varphi(2)+\varphi(3)]N^{A_1}, \qquad (8-74)$$

$$\psi_1^E=\sqrt{\frac{1}{6}}[2\varphi(1)-\varphi(2)-\varphi(3)]N_1^E,$$
$$\psi_2^E=\sqrt{\frac{1}{2}}[\varphi(2)-\varphi(3)]N_2^E. \tag{8-75}$$

例2　四面体群 T_d

由表 8.2-2 立刻求得 T_d 群的 CSCO-I $C=6\sigma_d=\sum_{i>j=1}^{4}(ij)$ 以及 S_4^z 对 $\varphi(i)$ 的作用

$$C\varphi(i)=3\varphi(i)+\varphi(j)+\varphi(k)+\varphi(l),\ i,\ j,\ k,\ l=1,\ 2,\ 3,\ 4\ \text{轮换},$$
$$S_4^z\varphi(i)=\varphi(i+1),\ i=1,\ 2,\ 3,\ 4\ [\text{约定}\ \varphi(5)\equiv\varphi(1)]. \tag{8-76}$$

解$(C,\ S_4^z)$的共同本征方程,可解出 A_1 表示和 T_2 表示第三分量:

$$\psi^{A_1}=\psi^{(6)}=\frac{1}{2}[\varphi(1)+\varphi(2)+\varphi(3)+\varphi(4)],$$
$$\psi_3^{T_2}=\psi_{-1}^{(2)}=\frac{1}{2}[\varphi(1)-\varphi(2)+\varphi(3)-\varphi(4)]. \tag{8-77a}$$

由(8-42)式及表 8.2-2 得到 T_2 表示的另外两个分量:

$$\psi_1^{T_2}=(34)\psi_3^{T_2}=\frac{1}{2}[\varphi(1)-\varphi(2)-\varphi(3)+\varphi(4)],$$
$$\psi_2^{T_2}=(23)\psi_3^{T_2}=\frac{1}{2}[\varphi(1)+\varphi(2)-\varphi(3)-\varphi(4)]. \tag{8-77b}$$

如果解本征方程(8-66)式时,某一不可约表示(μ)出现不止一次时,可利用内禀点群 $\overline{G}$ 的子群 $\overline{G}(s)$ 的 CSCO 来区分,详见文献[3].

(2) $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基和展开系数 $a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$

前面利用本征方程(8-66)式来求(8-71b)式的展开系数 $a_{\varkappa,i}^{(\mu)}$. Fieck 证明了,$O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基在顶点 i 处的数值 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)$ 和 $a_{\varkappa,i}^{(\mu)\tau}$ 有以下简单关系(不计归一系数):

$$a_{\varkappa,i}^{(\mu)l}=\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i), \tag{8-78}$$

$\boldsymbol{R}_i$ 为顶点(即等价原子所处的位置)矢径. 若上式右边 l 取不同的值,给出不同的 $a_{\varkappa,i}^{(\mu)l}$,则表明多重性大于1(这里就取 l 作为多重性指标 τ),否则表明多重性等于1. 当然在利用(8-78)式求 $a_{\varkappa,i}^{(\mu)l}$ 时,选尽可能小的 l 最方便. 现在来证明(8-78)式.

根据假定,$O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}$ 在群 G 元素 S 作用下按 $IR\ D^{(\mu)}$ 变换:

$$S\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{r})=\sum_{\varkappa'}D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(S)\phi_{\mu\varkappa'}^{(l)}(\boldsymbol{r}). \tag{8-79}$$

令上式中 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{R}_j$ 得

$$S\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_j)=\sum_{\varkappa'}D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(S)\phi_{\mu\varkappa'}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i). \tag{8-80}$$

另一方面利用(8-62b)式并注意 D 为实对称矩阵,上式左面可表为:

$$S\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_j)=\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(S^{-1}\boldsymbol{R}_j)=\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\sum_i D_{ij}(S^{-1})\boldsymbol{R}_i)=\sum_i D_{ji}(S)\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i). \tag{8-81}$$

比较(8-80)式和(8-81)式,得

$$\sum_{\varkappa'}D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(S)\phi_{\mu\varkappa'}^{(l)}(\boldsymbol{R}_j)=\sum_i D_{ji}(S)\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i). \tag{8-82}$$

要证明(8-78)式只需证明

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)l}(\boldsymbol{r})=N\sum_i\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)\varphi(i) \tag{8-83}$$

为 $G\supset G(s)$ 的 IR 基$(\nu)\varkappa$. 这里 N 为归一系数. 注意上式中 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)$为一系数,群 G 操作

S 仅作用于 $\varphi(i)=\varphi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i)$ 中的矢径 $\boldsymbol{r}$, 利用(8-82)式就可得到

$$
\begin{aligned}
S\psi_{\varkappa}^{(\mu)l}(\boldsymbol{r}) &= N\sum_{ij}\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)D_{ji}(S)\varphi(j)\\
&= N\sum_{\varkappa' j}D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(S)\varphi_{\mu\varkappa'}^{(l)}(\boldsymbol{R}_j)\varphi(j)=\sum_{\varkappa'}D_{\varkappa'\varkappa}^{(\mu)}(S)\psi_{\varkappa'}^{(\mu)l}(\boldsymbol{r}).
\end{aligned}
\tag{8-84}
$$

证毕.

必须指出,当多重性大于 1 时,(8-83)式对不同的 l 并不正交.

例 $\mathscr{C}_{3v}$ 群和 T_d 群

由表 8.3-5 附图中顶点 1, 2, 3 的坐标以及图 8.2-3 中顶点 1, 2, 3, 4 的坐标可得到表 8.7-1 和 8.7-2 中列的 x, y, z 值, 再由表 8.3-5 和表 8.3-16 得到 $O_3\supset G\supset G(s)$ 分类基 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{r})$, 令 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{R}_1$, $\boldsymbol{R}_2$, $\cdots$ 就可得到下表所列的 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)$.

表 8.7-1 $\mathscr{C}_{3v}$ 群 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)$ 数值表

$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{r})$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_1)$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_2)$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_3)$
$\phi^{A}=x^2+y^2$	1	1	1
$\phi_{E,1}^{l=1}=x$	1	$-1/2$	$-1/2$
$\phi_{E,2}^{l=1}=y$	0	$\sqrt{3}/2$	$-\sqrt{3}/2$
$\phi_{E,1}^{l=2}=x^2-y^2$	1	$-1/2$	$-1/2$
$\phi_{E,2}^{l=2}=-2xy$	0	$\sqrt{3}/2$	$-\sqrt{3}/2$

表 8.7-2 T_d 群 $\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_i)$ 数值表

$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{r})$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_1)$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_2)$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_3)$	$\phi_{\mu\varkappa}^{(l)}(\boldsymbol{R}_4)$
$\phi_{A_1}=x^2+y^2+z^2$	3	3	3	3
$\phi_{T_2,1}^{l=1}=x$	1	-1	-1	1
$\phi_{T_2,2}^{l=1}=y$	1	1	-1	-1
$\phi_{T_2,3}^{l=1}=z$	1	-1	1	-1

将表 8.7-1 和(8-75)式对照,表 8.7-2 和(8-77)式对照,可知用本征函数法得到的解和由(8-78)式得到的完全一致(包括相对位相在内).

表 8.7-1 特地给出了 $\phi_{\mu m}^{l=1}$ 和 $\phi_{\mu m}^{l=2}$ 两种结果, 它们给出相同的 $\phi_{\mu m}^{l}(\boldsymbol{R}_i)$ 值, 这说明在这里 E 表示只出现一次.

(3) 原子轨道 l 不为零的情形

若以第 i 个原子为中心的原子轨道波函数为 $\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(i)=\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i)$, 它属于 $O_3\supset G\supset G(s)$ 的 $IR(l_2,\ \mu_2,\ \varkappa_2)$,先考虑群 G 操作 S 对它的作用

$$
\begin{aligned}
S\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(i) &= \phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(S^{-1}\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i)=\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(S^{-1}(\boldsymbol{r}-S\boldsymbol{R}_i))\\
&= \sum_{\varkappa'}D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)\phi_{\mu_2\varkappa_2'}^{l_2}(\boldsymbol{r}-S\boldsymbol{R}_i)\\
&= \sum_{\varkappa_2'}D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)\phi_{\mu_2\varkappa_2'}^{l_2}(\boldsymbol{r}-\sum_j D_{ji}(S)\boldsymbol{R}_j).
\end{aligned}
\tag{8-85}
$$

由于(8-85)式中对 j 求和只有一项不为零(见(8-62a)式),因此对 j 求和可提到外面来,于是

$$
S\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(i)=\sum_{j\varkappa_2'}D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)D_{ji}(S)\phi_{\mu_2\varkappa_2'}^{l_2}(j),
\tag{8-86}
$$

上式表明 $\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(i)$ 在群 G 作用下按 $D^{(\mu_2)}\otimes D$ 变换. 引进

$$
\varphi_{\mu_1\varkappa_1,\ \mu_2\varkappa_2}=\sum_i\phi_{\mu_1\varkappa_1}^{l_1}(\boldsymbol{R}_i)\phi_{\mu_2\varkappa_2}^{l_2}(i),
\tag{8-87}
$$

利用(8-86)式、(8-82)式得

$$
\begin{aligned}
S\varphi_{\mu_1\varkappa_1,\ \mu_2\varkappa_2} &= \sum_{ij\varkappa_2'}\phi_{\mu_1\varkappa_1}^{l_1}(\boldsymbol{R}_i)D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)D_{ji}(S)\phi_{\mu_2\varkappa_2'}^{l_2}(j)\\
&= \sum_{\varkappa_2'\varkappa_1'j}D_{\varkappa_1'\varkappa_1}^{(\mu_1)}(S)D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)\phi_{\mu_1\varkappa_1'}^{l_1}(\boldsymbol{R}_j)\phi_{\mu_2\varkappa_2'}^{l_2}(j)\\
&= \sum_{\varkappa_2\varkappa_1'}D_{\varkappa_1'\varkappa_1}^{(\mu_1)}(S)D_{\varkappa_2'\varkappa_2}^{(\mu_2)}(S)\varphi_{\mu_1\varkappa_1',\ \mu_2\varkappa_2'},
\end{aligned}
\tag{8-88}
$$

因此在群 G 作用下, $\varphi_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}$ 按 $D^{(\mu_1)}\otimes D^{(\mu_2)}$ 变换. 利用点群 G 的 CG 系数, 立刻可得到

SALC 波函数

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}=\sum_{\varkappa_1\varkappa_2} C^{(\mu)\theta,\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\varphi_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}, \tag{8-89a}$$

即

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}(\boldsymbol{r})=N\sum_{\varkappa_1\varkappa_2 i} C^{(\mu)\theta,\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\phi^{l_1}_{\mu_1\varkappa_1}(\boldsymbol{R}_i)\phi^{l_2}_{\mu_2\varkappa_2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i). \tag{8-89b}$$

式中 N 为归一系数,多重性指标

$$\tau=\mu_1,\ \mu_2,\ \theta,\ l_1. \tag{8-90}$$

l_1 的选取见前面(2)中所讨论的．比较(8-59)式和(8-89)式,可知(8-59)式中的展开系数

$$b^{(\mu)\tau}_{\varkappa,\varkappa_2 i}=N\sum_{\varkappa_1} C^{(\mu)\theta,\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\phi^{l_1}_{\mu_1\varkappa_1}(\boldsymbol{R}_i). \tag{8-91}$$

当 μ_2 为一维表示时,(8-89b)式简化为

$$\psi_{\varkappa}^{(\mu)\tau}(\boldsymbol{r})=N\sum_{i}\phi^{l_1}_{\mu_1\varkappa_1}(\boldsymbol{R}_i)\phi^{l_2}_{\mu_2}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_i), \tag{8-92}$$

$$(\mu)=(\mu_1)\times(\mu_2).$$

当(μ_2)为全等表示时,(8-89)式或(8-92)式就退化为(8-83)式.

例 T_d 群,p 原子轨道.

考虑 T_d 群,四个等价原子轨道为 p 轨道的情形,即 $l_2=1$, p_x, p_y, p_z 轨道波函数比例于 x, y, z,由表 8.3-16 知道,它们属于 T_2 表示．因此(8-89b)式中的$\{\phi^{l_2}_{\mu_2\varkappa_2}(i)\}=\{\phi^{(p)}_{T_2\varkappa_2}(i)\}=(x(i),\ y(i),\ z(i))$. 由(8-89b)式,表 8.7-2 以及 T_d 群 CG 系数((8-56)式)即可得到 T_d 群 p 轨道的 SALC 波函数,结果列在表 8.7-3.

表 8.7-3　T_d 群 p 轨道 SALC 波函数 $|(\mu_1\mu_2)\mu,\ \varkappa\rangle=N\sum_{\varkappa\varkappa_2 i}C^{\mu,\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\phi^{l_1-1}_{\mu_1\varkappa_1}(\boldsymbol{R}_i)\phi^{l_2-1}_{\mu_2\varkappa_2}(i)$

$(\mu_1,\ \mu_2)\mu,\ \varkappa$	$x(1)$	$x(2)$	$x(3)$	$x(4)$	$y(1)$	$y(2)$	$y(3)$	$y(4)$	$z(1)$	$z(2)$	$z(3)$	$z(4)$
$(T_2,\ T_2)A_1$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$
$(T_2,\ T_2)E,\ 1$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$-\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{24}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{6}}$
$E,\ 2$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$				
$(T_2,\ T_2)T_1,\ 1$					$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$
$T_1,\ 2$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$					$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$
$T_1,\ 3$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$				
$(T_2,\ T_2)T_2,\ 1$					$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$
$T_2,\ 2$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$					$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$
$T_2,\ 3$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$				
$(A_1,\ T_2)T_2,\ 1$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$								
$T_2,\ 2$					$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				
$T_2,\ 3$									$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$

(8-89)式给出了求单电子 SALC 波函数的普遍方法. 用此公式计算高对称性点群(如 T_d, O_h 群等)和高 l_2 的原子轨道比较方便. 在一些较简单的情形,则可不必利用(8-89)式,可用投影算符法或直接用本征函数法更为方便. 下面举轴对称群的几个例子. 假定原子轨道为 p_z, z 为主轴.

(4) $\mathscr{C}_n(\mathscr{C}_{nh})$ 群

设 n 个等价原子位于正 n 边形的顶点,如碳环体系 C_nH_n 中的 n 个碳原子,每个碳原子贡献一个 p_z 轨道 $\varphi(i)$.

由(8-48)式知 $\mathscr{C}_n$ 群的群元(即类算符) C_n^j 的第 μ 个 IR 的本征值为

$$\lambda_j^{(\mu)}=e^{-2\pi\mu ji/n} \tag{8-93a}$$

由 $\chi_j^{(\mu)}=\frac{h_\mu}{g_j}\lambda_j^{(\mu)}$[(3-68)式]可知. 现在特征标 $\chi_j^\mu=\lambda_j^{(\mu)}$. 由(3-235a)、(8-93a)式得到 $\mathscr{C}_n$ 群投影算符(不计归一系数)

$$P^{(\mu)}=\sum_{j=1}^{n}e^{(2\pi\mu j)i/n}C_n^j. \tag{8-93b}$$

将它作用在任一原子轨道,例如 $\varphi(1)$ 上,并利用

$$C_n\varphi(1)=\varphi(2),\ C_n^j\varphi(1)=\varphi(j+1), \tag{8-94}$$

(这里约定 $\varphi(n+1)\equiv\varphi(1)$) 得到 C_n 的一个 IR 基

$$\psi^{(\mu)}=\sqrt{\frac{1}{n}}\sum_{j=1}^{n}e^{i(j-1)\mu\beta}\varphi(j), \tag{8-95}$$

$$\beta=2\pi/n,\ \mu=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots,\ \pm\left[\frac{n}{2}\right].$$

(5) $D_n(D_{nh})$ 群

和 § 8.4 一样,把 $\mathscr{C}_n$ 群的两个共轭表示的 IR 基(8-95)式组合成两个实数解,就给出 $D_n(D_{nh})$ 群的二维不可约基

$$\psi_1^{E_\mu}=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{j=1}^{n}\sin((j-1)\mu\beta)\varphi(j), \tag{8-96a}$$

$$\mu=1,\ 2,\ \cdots,\ \left[\frac{n}{2}\right].$$

$$\psi_2^{E_\mu}=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{j=1}^{n}\cos((j-1)\mu\beta)\varphi(j), \tag{8-96b}$$

令(8-96a)中 $\mu=0$, 或 $\mu=0$, $n/2$ (当 n 为偶数时),得到一个或两个一维表示

$$\psi^A=\sqrt{\frac{1}{n}}\sum_{j=1}^{n}\varphi(j),\ n\text{ 为奇数或偶数} \tag{8-97a}$$

$$\psi^B=\sqrt{\frac{1}{n}}\sum_{j=1}^{n}(-)^{j+1}\varphi(j),\ \text{当 } n \text{ 为偶数}. \tag{8-97b}$$

我们选通过顶点 1 的 x 方向的二度轴 C_2^x 为 $C(s)$ (见表 8.3 D_n 和 D_{nh} 的附图),由于 $\varphi(i)$ 为 p_z 轨道,所以在 C_2^x 和 σ_h 作用下的变换性质为

$$C_2^x\varphi(1)=-\varphi(1),\ C_2^x\varphi(i)=-\varphi(n-i+2),\ \sigma_h\varphi(i)=-\varphi(i). \tag{8-98}$$

所以 $C_2^x\psi_1^{E_\mu}=\psi_1^{E_\mu}$, $C_2^x\psi_2^{E_\mu}=-\psi_2^{E_\mu}$, 即 $\psi_1^{E_\mu}$, $\psi_2^{E_\mu}$ 分别为 E_μ 表示的第一、二分量(若 $\varphi(i)$ 都为 s 轨道,则(8-96)式一、二分量刚好互换).

例如令 $n=5$, $\beta=72°$, 得到 D_{5h} 的归一的 SALC:

$$\psi_1^{E_1''}=\sqrt{\frac{2}{5}}[\sin\beta(\varphi(2)-\varphi(5))+\sin 2\beta(\varphi(3)-\varphi(4))],$$

$$\psi_2^{E_1''}=\sqrt{\frac{2}{5}}[\varphi(1)+\cos\beta(\varphi(2)+\varphi(5))+\cos 2\beta(\varphi(3)+\varphi(4))],$$

$$\psi_1^{E_2''}=\sqrt{\frac{2}{5}}[\sin 2\beta(\varphi(2)-\varphi(5))-\sin\beta(\varphi(3)-\varphi(4))], \tag{8-99}$$

$$\psi_2^{E_2''}=\sqrt{\frac{2}{5}}[\varphi(1)+\cos 2\beta(\varphi(2)+\varphi(5))+\cos\beta(\varphi(3)+\varphi(4))],$$

$$\psi^{A_2''}=\sqrt{\frac{1}{5}}\sum_{i=1}^{5}\varphi(i).$$

令 $n=6$, $\beta=60°$, 得到 D_{6h} 的 SALC

$$\psi^{A_{2u}}=\sqrt{\frac{1}{6}}\sum_{i=1}^{6}\varphi(i),$$

$$\psi^{B_{1g}}=\sqrt{\frac{1}{6}}[\varphi(1)-\varphi(2)+\varphi(3)-\varphi(4)+\varphi(5)-\varphi(6)],$$

$$\psi_1^{E_{1g}}=\frac{1}{2}[\varphi(2)+\varphi(3)-\varphi(5)-\varphi(6)],$$

$$\psi_2^{E_{1g}}=\sqrt{\frac{1}{12}}[2\varphi(1)+\varphi(2)-\varphi(3)-2\varphi(4)-\varphi(5)+\varphi(6)], \tag{8-100}$$

$$\psi_1^{E_{2u}}=\frac{1}{2}[\varphi(2)-\varphi(3)+\varphi(5)-\varphi(6)],$$

$$\psi_2^{E_{2u}}=\sqrt{\frac{1}{12}}[2\varphi(1)-\varphi(2)-\varphi(3)+2\varphi(4)-\varphi(5)-\varphi(6)].$$

(6) Hückel 近似

利用(8–60b)式求解分子轨道时还是相当麻烦的，常常要作进一步的近似，其中最粗略的一种近似称为 Hückel 近似，其中包含以下三个假定

(1) 各原子轨道互相正交

$$g_{ij}=\langle\varphi(i)|\varphi(j)\rangle=\delta_{ij} \tag{8-101}$$

(2) H 的对角元等于常数

$$\langle\varphi(i)|H|\varphi(i)\rangle=E_0. \tag{8-102}$$

(3) H 只有在相邻原子轨道间才有对角元 F，且 F 为常数

$$\langle\varphi(i)|H|\varphi(j)\rangle=\begin{cases}-F & \\ 0 & \end{cases}\text{当 } i \text{ 和 } j \text{ 为}\begin{matrix}\text{相　邻}\\\text{不相邻}\end{matrix}\text{原子,} \tag{8-103}$$

式中 $F>0$. Hückel 近似虽然是一个非常粗糙的近似，但它还是一个较成功的理论. 虽然定量上不完全靠得住，但在定性上，或系统性上能给出正确的结果.

例　在 Hückel 近似下，求 C_nH_n 分子轨道的能级.

由(8–96)式得：

$$E_\mu=\frac{2}{n}\left\langle\sum_{j=1}^{n}\cos((j-1)\mu\beta)\varphi(j)\,|H|\sum_{j'=1}^{n}\cos((j'-1)\mu\beta)\varphi(j')\right\rangle$$

$$=E_0-\frac{4}{n}F\sum_{j=1}^{n}\cos((j-1)\mu\beta)\cos(j\mu\beta)$$

$$= E_0 - \frac{4}{n} F \left[\cos(\mu\beta) \sum_{j=1}^{n} \cos^2(j\mu\beta) + \sin\beta \sum_{j=1}^{n} \sin(j\mu\beta)\cos(j\mu\beta) \right]$$

$$= E_0 - 2F\cos(\mu\beta). \tag{8-104}$$

由(8-104)式可画出 D_{nh} 分子轨道能级图，见图 8.7-1. 图 8.7-2 给出 D_{6h} 分子轨道能级图. 图中改用小写字母代表单电子能级所属的 IR. 画这种能级图有一个简单方法：画一个正 n 边形，如图 8.7-2 所示，并画出处于同一水平线上的两顶点的联线，就给出能级图.

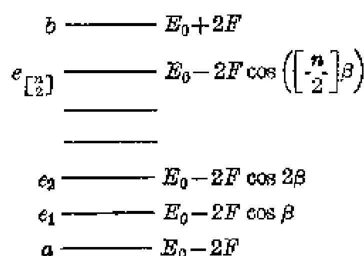


图 8.7-1 D_{nh}分子轨道能级图 $\beta=2\pi/n$

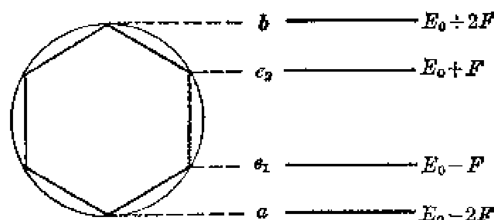


图 8.7-2 D_{6h} 分子轨道能级图

成键轨道：凡能量小于 E_0 的轨道称为成键轨道. 如 D_{6h} 中一维表示 a 轨道和二维表示 e 轨道为成键轨道. 电子处在这种轨道上，能量上有利.

反键轨道：能量大于 E_0 的轨道称为反键轨道. 如 D_{6h} 中的 e_2 和 b 轨道.

苯分子的基态能量：图 8.7-2 所示的能级图是苯分子剥去 6 个电子后，单个电子在 6 价苯离子上运动的能级图，现在把 6 个电子填入图 8.7-2 最低轨道，得到 $(a)^2(e_1)^4$ 组态，即为基态组态. 不考虑组态混合时，基态能量为

$$E_g = 2(E_0-2F)+4(E_0-F)=6E_0-8F. \tag{8-105}$$

由此可见，由于各原子轨道间的相互作用，使能量降低了 $8F$，因此苯分子很稳定.

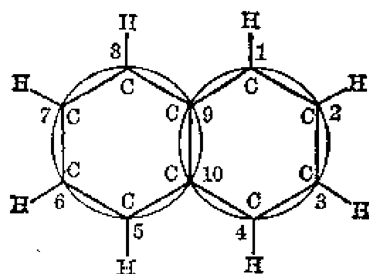


图 8.7-3 萘分子 D_{2h} 对称

萘分子 $C_{10}H_8$

萘分子 $C_{10}H_8$ 具有 D_{2h} 对称性，如图 8.7-3 所示，每个顶点原子提供一个 p_z 轨道，容易看出，在 D_{2h} 作用下，$\varphi(1)\cdots\varphi(10)$，分成三个子集$(\varphi(1), \varphi(4), \varphi(5), \varphi(8))$，$(\varphi(2), \varphi(3), \varphi(6), \varphi(7))$，$(\varphi(9), \varphi(10))$. 由表 8.3-1 知道，CSCO 为$(C_2^z, C_2^y, I)$. 容易求出它们的共同本征函数，列在表 8.7-4 中.

表 8.7-4 萘分子的 SALC 波函数

C_2^z	C_2^y	I		$\varphi(2)$ $\varphi(1)$	$\varphi(3)$ $\varphi(4)$	$\varphi(6)$ $\varphi(5)$	$\varphi(7)$ $\varphi(8)$	$\varphi(9)$	$\varphi(10)$
−1	−1	−1	$\psi^{B_{1u}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
1	1	−1	ψ^{A_u}	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$		
−1	1	1	$\psi^{B_{2g}}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$		
1	−1	1	$\psi^{B_{3g}}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		
1	−1	1	$\psi^{B_{3g}}$					$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$
−1	−1	−1	$\psi^{B_{1u}}$					$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$

第九章　群论在多粒子体系中的应用

群论是处理多粒子体系的一个重要工具，本章只讨论群论在以下几个方面的应用：纯组态壳模型，混合组态壳模型，核反应结团模型，分子壳模型，而且只涉及到应用的主要方面，一些细节问题可参看文中给出有关的参考文献

本章用圆括号 $|\Psi)$ 代表反对称态.

§9.1　纯组态壳模型

假定考虑 l 轨道上有 f 个粒子，下面讨论如何计算单体算符和两体算符在 f 个粒子反对称波函数(7-182)式上的矩阵元.

1．单体算符

利用单粒子母分系数(7-184)式可将单体算符矩阵元化简：

$$\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha\beta LSTM \end{matrix}\middle| \sum_{i=1}^{f} Q(i) \middle| \begin{matrix} l^f[\nu'] \\ \alpha'\beta'L'S'T'M' \end{matrix}\right) = f\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha\beta LSTM \end{matrix}\middle| Q(f) \middle| \begin{matrix} l^f[\nu'] \\ \alpha'\beta'L'S'T'M' \end{matrix}\right)$$

$$= f \sum_{\nu_1\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1} \frac{h_{\nu_1}}{\sqrt{h_\nu h_{\nu'}}} C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]} C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,[1]} C^{[\nu']\alpha' L'}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]} C^{[\tilde{\nu}']\beta' S'T'}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,[1]}$$

$$\cdot\left\langle \left[\psi\left(\begin{matrix} l^{f-1}[\nu_1] \\ \alpha_1\beta_1L_1S_1T_1 \end{matrix}\right)\psi(f) \right]^{LST}_{M} \middle| Q(f) \middle| \left[\psi\left(\begin{matrix} l^{f-1}[\nu_1] \\ \alpha_1\beta_1L_1S_1T_1 \end{matrix}\right)\psi(f) \right]^{L'S'T'}_{M'} \right\rangle \tag{9-1}$$

式中 M 代表 M_L, M_S, M_T, 头一步利用了波函数的反对称性，最后一步利用了第 f 个粒子的算符 $Q(f)$ 不会改变前 $f-1$ 个核子状态的量子数 $\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1$. $\psi(f)$ 为第 f 个粒子的空间、自旋、同位旋波函数. 将 $f-1$ 个粒子的波函数积分积掉，上式最后一个因子变为：

$$\sum_{\substack{M_1M_{S_1}M_{T_1} \\ m_lm_sm_tm_l'm_s'm_t'}} C^{LM_L}_{L_1M_1,lm_l} C^{SM_S}_{S_1M_{S_1},1/2m_s} C^{TM_T}_{T_1M_{T_1},1/2m_t} C^{L'M_L'}_{L_1M_1,lm_l'} C^{S'M_S'}_{S_1M_{S_1},1/2m_s'}$$

$$\cdot C^{T'M_T'}_{T_1M_{T_1},1/2m_t'} \langle \psi_{m_lm_sm_t} | Q | \psi_{m_l'm_s'm_t'} \rangle. \tag{9-2}$$

由此看到单粒子母分系数所起的作用，利用它可将多粒子体系中单体算符的矩阵元简化为计算单粒子体系中该算符的矩阵元，而不需知道多粒子体系波函数的具体形式.

上述结论可推广到一般情形：利用 f_2-粒子母分系数，可将多粒子体系中 f_2 体算符化简，化为在 f_2 粒子体系中计算该算符的矩阵元.

如果算符 Q 只作用在坐标空间，并且是转动群 R_3 的不可约张量 $Q^{(\lambda)}_{\mu}$，则利用 SO_3 群 CG 系数和 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ ISF 的幺正性，以及不可约矩阵元的定义(3-319)式，由(9-1)式、(9-2)式得：

$$\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha\beta LST \end{matrix}\middle\| \sum_{i=1}^{f} Q^{(\lambda)}_{\mu}(i) \middle\| \begin{matrix} l^f[\nu'] \\ \alpha'\beta'L'S'T' \end{matrix}\right)$$

$$= \delta_{\nu\nu'}\delta_{\beta\beta'}\delta_{SS'}\delta_{TT'} f \sum_{\nu_1\alpha_1L_1} \frac{h_{\nu_1}}{h_\nu} C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]} \cdot C^{[\nu]\alpha' L'}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[1]} U(L_1 l L \lambda;\, L' l) \langle l \| Q^{(\lambda)} \| l \rangle. \tag{9-3}$$

例如动能算符 T 为零级张量，令上式中 $\lambda=0$，并利用(7-161)式以及 $\sum_{\nu_1} h_{\nu_1}/h_\nu=1$ 得到:

$$\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha\beta LST \end{matrix}\middle\| \sum_{i=1}^{f} T(i) \middle\| \begin{matrix} l^f[\nu'] \\ \alpha'\beta'L'S'T' \end{matrix}\right)=\delta_{\nu\nu'}\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}\delta_{LL'}\delta_{SS'}\delta_{TT'}f\langle l\|T\|l\rangle. \tag{9-4}$$

2. 两体算符

假定相互作用势 V_{ij} 为中心势，利用双粒子母分系数[令(7-183)式中 $n_2=2$]可得到

$$\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha\beta LST \end{matrix}\middle\| \sum_{i>j=1}^{f} V_{ij} \middle\| \begin{matrix} l^f[\nu'] \\ \alpha'\beta'LST \end{matrix}\right)=\binom{f}{2}\sum\frac{h_{\nu_1}}{\sqrt{h_\nu h_{\nu'}}}C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[\nu_2]L_2}C^{[\nu']\alpha' L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[\tilde{\nu}_2]L_2}$$
$$\cdot C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,[\tilde{\nu}_2]S_2 T_2}C^{[\tilde{\nu}']\beta' ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1 S_1 T_1,[\tilde{\nu}_2]S_2 T_2}\left\langle\begin{matrix} l^2[\nu_2] \\ L_2S_2T_2 \end{matrix}\middle\| V_{f-1,f} \middle\| \begin{matrix} l^2[\nu_2] \\ L_2S_2T_2 \end{matrix}\right\rangle. \tag{9-5}$$

上式对 $[\nu_1]\,[\nu_2]\alpha_1\beta_1L_1S_1T_1L_2S_2T_2$ 求和．进一步的讨论见 Elliott 和 Lane 的文章(1957)．

容易将(9-5)式推广到超核 $SU_6\supset SU_3\times SU_2$ 分类[97]，总反对称波函数(7-182)式推广为:

$$\left|\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha LM,\ \beta[\mu]IYI_zSS_z \end{matrix}\right\rangle=\sum_m\frac{\Lambda^\nu_m}{\sqrt{h_\nu}}\left|\begin{matrix} l^f[\nu] \\ m,\ \alpha LM \end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix} \gamma^f[\tilde{\nu}] \\ \tilde{m},\ \beta[\mu]IYI_zSS_z \end{matrix}\right\rangle. \tag{9-6}$$

由(7-167)式、和(7-180)式得到

$$\left(\begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha L,\ \beta[\mu]IYS \end{matrix}\middle\| \sum_{i>j=1}^{f} V_{ij} \middle\| \begin{matrix} l^f[\nu] \\ \alpha L,\ \beta[\mu]IYS \end{matrix}\right)=\binom{f}{2}\sum\frac{h_{\nu_1}}{h_\nu}$$
$$\cdot\left(C^{[\nu]\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1 L_1,[\nu_2]L_2}C^{[\tilde{\nu}],\beta[\mu]\theta S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,[\tilde{\nu}_2][\mu_2]S_2}C^{[\mu]\theta IY}_{[\mu_1]I_1Y_1,[\mu_2]I_2Y_2}\right)^2$$
$$\cdot\left\langle\begin{matrix} l^2[\nu_2] \\ L_2[\mu_2]I_2Y_2S_2 \end{matrix}\middle\| V_{f-1,f} \middle\| \begin{matrix} l^2[\nu_2] \\ L_2[\mu_2]I_2Y_2S_2 \end{matrix}\right\rangle, \tag{9-7}$$

上式对 $[\nu_1]\,[\mu_1]\,[\nu_2]\,[\mu_2]\alpha_1\beta_1L_1I_1Y_1S_1L_2I_2Y_2S_2\theta$ 求和．类似地可写出两体势的非对角矩阵元．

§9.2 $A+B$ 体系的反对称波函数

假定有 A, B 两个核，或一个原子核中有 A、B 两个壳，粒子数为 f_1、f_2, $f=f_1+f_2$．A、B 核和 $A+B$ 系统的一些量子数列在下表

表 9·2

	A	B	$A+B$
空间对称性	$[\nu_1]$	$[\nu_2]$	$[\nu]$
轨道角动量	L_1	L_2	L
自　旋	S_1	S_2	S
同位旋	T_1	T_2	T
自旋空间对称性	$[\sigma_1]$	$[\sigma_2]$	$[\sigma]$
同位旋空间对称性	$[\mu_1]$	$[\mu_2]$	$[\mu]$

$$\begin{aligned}&[\sigma_i]=\left[\frac{f_i}{2}+S_i,\ \frac{f_i}{2}-S_i\right],\quad [\sigma]=\left[\frac{f}{2}+S,\ \frac{f}{2}-S\right],\\&[\mu_i]=\left[\frac{f_i}{2}+T_i,\ \frac{f_i}{2}-T_i\right],\quad [\mu]=\left[\frac{f}{2}+T,\ \frac{f}{2}-T\right].\end{aligned} \tag{9-8}$$

A、B 核的反对称波函数表为 $\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\ L_i\beta_iS_iT_i\end{matrix}\right)$ [(7-182) 式]. 这里以及下面经常略去附加量子数 α_i 及磁量子数 $M_L M_S M_{T_i}$. $A+B$ 体系的总反对称波函数为

$$\Psi_{LST}=\mathscr{A}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ L_1\beta_1S_1T_1\end{matrix}\right)_{\omega_1^0}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ L_2\beta_2S_2T_2\end{matrix}\right)_{\omega_2^0}F(A-B)\right]^{LST}. \tag{9-9}$$

式中 $(\omega_1^0)=(1\cdots f_1)$, $(\omega_2^0)=(f_1+1,\ \cdots,\ f)$. 如果 A、B 代表壳模型中两个不同的壳, 则 $F(A-B)=1$; 如果 A, B 代表参与核反应的两个结团(Cluster), 则 $F(A-B)$代表 A、B 核之间相对运动波函数

$$F(A-B)=F(\boldsymbol{R}_A-\boldsymbol{R}_B), \tag{9-10}$$

式中 $\boldsymbol{R}_A$、$\boldsymbol{R}_B$ 为 A、B 的质心坐标, $\mathscr{A}$ 为反对称算符,

$$\mathscr{A}=\begin{pmatrix}f\\ f_1\end{pmatrix}^{-1/2}\sum_{\omega}\delta_{\omega}\begin{pmatrix}\omega^0\\ \omega\end{pmatrix}, \tag{9-11}$$

式中 $\begin{pmatrix}\omega^0\\ \omega\end{pmatrix}$ 为保序置换算符[(4-130)式], δ_ω 为它的置换字称.

反对称波函数(9-9)式在计算 A、B 两群核子之间的相互作用矩阵元时并不方便. 更方便的是先把空间部分组合成 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基(如果 A、B 分别为 l_1、l_2 壳, 则 $m=2l_1+1$, $n=2l_2+1$)

$$\begin{aligned}&\left|\begin{matrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ m,\ LM_L; & L_1\quad L_2\end{matrix}\right\rangle\\ &=\sum_{m_1m_2\omega}C^{[\nu]\tau,\,m}_{\nu_1m_1,\,\nu_2m_2,\,\omega}\begin{pmatrix}\omega^0\\ \omega\end{pmatrix}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0,\ L_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0,\ L_2\end{matrix}\right\rangle F(A-B)\right]^L_{M_L}.\end{aligned} \tag{9-12}$$

再把自旋同位旋部分组合成 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 分类基

$$\left|\begin{matrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m},\ \beta STM_SM_T\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_\sigma m_\mu}C^{[\tilde{\nu}]\beta,\,\tilde{m}}_{[\sigma]m_\sigma,\ [\mu]m_\mu}\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ m_\sigma,\ SM_S\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu]\\ m_\mu,\ TM_T\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-13}$$

最后利用(4-125)式把它们组合成总的反对称波函数

$$\left|\begin{matrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ L\beta ST,\ L_1 & L_2\end{matrix}\right)=\sum_m\frac{\Lambda^\nu_m}{\sqrt{h_\nu}}\left|\begin{matrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ m,\ L; & L_1\quad L_2\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m}\beta ST\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-14}$$

(9-9)和(9-14)式都是反对称波函数, 它们之间的关系为:

$$\begin{aligned}&\left|\begin{matrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ L\beta ST, & L_1\quad L_2\end{matrix}\right)\\ &=\sum_{\substack{\beta_1S_1T_1\\ \beta_2S_2T_2}}C^{[\tilde{\nu}]\tau,\,\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2}\mathscr{A}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ L_1\beta_1S_1T_1\end{matrix}\right)_{\omega_1^0}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ L_2\beta_2S_2T_2\end{matrix}\right)_{\omega_2^0}F(A-B)\right]^{LST}.\end{aligned} \tag{9-15}$$

上式成立的依据是右方的 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF 保证了右方自旋-同位旋波函数属于 SU_4 群 $IR[\tilde{\nu}]$, 而右方反对称算符又保证了右方为反对称态, 所以空间波函数必属于对称性$[\nu]$. 利用 ISF 性质(7-154)式, 上式可逆展开:

$$\begin{aligned}&\mathscr{A}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\ L_1\beta_1S_1T_1\end{matrix}\right)_{\omega_1^0}\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\ L_2\beta_2S_2T_2\end{matrix}\right)_{\omega_2^0}F(A-B)\right]^{LST}\\ &=\sum_{\nu\beta ST}C^{[\tilde{\nu}]\tau,\,\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,\ [\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2}\left|\begin{matrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ L\beta ST, & L_1\quad L_2\end{matrix}\right).\end{aligned} \tag{9-16}$$

以上式子是针对 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ 情形的，容易将它推广到超核 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 情形，这时只需将上述公式中的 $[\mu]$ 理解为 SU_3 的 IR，$T \to [\mu] IY$，自旋同位旋波函数(9-13)式改为 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 波函数

$$\left| \begin{matrix} [\tilde{\nu}] \\ \tilde{m},\ \beta[\mu] IYI_z,\ SS_z \end{matrix} \right\rangle = \sum_{m_\sigma m_\mu} C^{[\tilde{\nu}]\beta, \tilde{m}}_{[\sigma] m_\sigma, [\mu] m_\mu} \left| \begin{matrix} [\sigma] \\ m_\sigma,\ SS_z \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} [\mu] \\ m_\mu,\ IYI_z \end{matrix} \right\rangle. \tag{9-17a}$$

(9-14)式改为

$$\left| \begin{matrix} [\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2] \\ L\beta[\mu] IYS; & L_1 \quad L_2 \end{matrix} \right) = \sum_m \frac{A^\nu_m}{\sqrt{h_\nu}} \left| \begin{matrix} [\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2] \\ m,\ L; & L_1\ L_2 \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} [\tilde{\nu}] \\ \tilde{m},\ \beta[\mu] IYS \end{matrix} \right\rangle. \tag{9-17b}$$

利用(7-179)式，可将(9-15)式推广为

$$\begin{aligned} \left| \begin{matrix} [\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2] \\ L\beta[\mu] IYS, & L_1\ L_2 \end{matrix} \right) = & \sum_{\beta_1\mu_1 S_1 \beta_2 \mu_2 S_2} C^{[\tilde{\nu}]\tau, \beta\mu S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1\mu_1 S_1, [\tilde{\nu}_2]\beta_2\mu_2 S_2} \\ & \cdot \mathscr{A} \left[\left| \begin{matrix} [\nu_1] \\ L_1\beta_1[\mu_1] S_1 \end{matrix} \right\rangle_{\omega_1^0} \left| \begin{matrix} [\nu_2] \\ L_2\beta_2[\mu_2] S_2 \end{matrix} \right\rangle_{\omega_2^0} F(A-B) \right]^{L[\mu]S}_{IY}. \end{aligned} \tag{9-17c}$$

(9-16)式推广为

$$\begin{aligned} & \mathscr{A} \left[\left| \begin{matrix} [\nu_1] \\ L_1\beta_1[\mu_1] S_1 \end{matrix} \right)_{\omega_1^0} \left| \begin{matrix} [\nu_2] \\ L_2\beta_2[\mu_2] S_2 \end{matrix} \right)_{\omega_2^0} F(A-B) \right]^{L[\mu]S}_{IY} \\ & = \sum_{\nu\tau\beta} C^{[\tilde{\nu}]\tau, \beta[\mu]S}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1, [\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]S_2} \left| \begin{matrix} [\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2] \\ L\beta[\mu] IYS, & L_1\ L_2 \end{matrix} \right). \end{aligned} \tag{9-17d}$$

以上式子中省略了磁量子数 M, I_z, S_z.

§ 9.3 夸克模型中对称基和物理基之间的变换

我们考虑 A, B 两个夸克团，分别有 f_1 和 f_2 个夸克．为书写简洁起见，假定只有 u, d 两种夸克．推广到多味夸克是直截了当的．如果一个夸克处于 $A(B)$ 团，则说该夸克处于轨道态 $a(b)$．取以下群链的分类基描述 A、B 夸克团．

$$\begin{matrix} SU_{24} \supset & SU_2 \times SU_{12} & (\supset SU_3 & \times SU_4) \\ & \text{轨道} & \text{色} & \text{自旋同位旋} \\ IR\text{ 标志:}\quad [1^{f_i}] & [\nu_i] \quad [\tilde{\nu}_i] & [\sigma_i] & [\mu_i] \end{matrix}$$

利用置换群 CG 系数，这种分类基可表为:

$$\left| \begin{matrix} [\nu_i] \\ [\sigma_i] W_i [\mu_i] S_i T_i \end{matrix} \right) = \sum_{m_1 m_2 m} \frac{A^{\nu_i}_m}{\sqrt{h_{\nu_i}}} C^{[\tilde{\nu}_i], \tilde{m}}_{\sigma_i m_1, \mu_i m_2} \psi^{[\nu_i]}_m(\boldsymbol{r}) \left| \begin{matrix} [\sigma_i] \\ m_1,\ W_i \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} [\mu_i] \\ m_2, S_i T_i \end{matrix} \right\rangle. \tag{9-18a}$$

这里 $\psi(\boldsymbol{r})$ 为轨道波函数．W_i 为色空间 SU_3 IR 的分量指标．例如核子 N 及其共振态 Δ 可表为

$$|N) = \left| \begin{matrix} [3] \\ [1^3][3] 1/2, 1/2 \end{matrix} \right), \quad |\Delta) = \left| \begin{matrix} [3] \\ [1^3][3] 3/2, 3/2 \end{matrix} \right). \tag{9-18b}$$

这两个夸克团的总反对称波函数可表为:

$$\mathscr{A} \left[\left| \begin{matrix} [\nu_1] a^{f_1} \\ \sigma_1 \mu_1 S_1 T_1 \end{matrix} \right)_{\omega_0^1} \left| \begin{matrix} [\nu_2] b^{f_2} \\ \sigma_2 \mu_2 S_2 T_2 \end{matrix} \right)_{\omega_0^2} \right]^{[\sigma]ST}_{W M_S M_T}. \tag{9-19a}$$

这里方括号代表用 $SU_3\,CG$ 系数和 $SU_2\,CG$ 系数将它们组合成具有确定 SU_3 对称性 $[\sigma]W$，确定道自旋 S 和同位旋 T. Harvey (1981) 称 (9-19a) 式为物理基. 这种基的优点是物理意义明确. 不过为了利用母分系数技巧计算矩阵元，更方便的是采用 $n=f_1+f_2$ 个夸克的 $SU_{24}\supset SU_2\times SU_{12}(\supset SU_3\times SU_4)$ 分类基

$$\left|\begin{matrix}[\nu]a^{f_1}b^{f_2}\\ \alpha[\sigma]W[\mu]\beta STM_SM_T\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-19b}$$

上式称为对称基. 类似于 (9-16) 式，物理基和对称基之间差一个幺正变换 (Chen et al 1983)：

$$\mathscr{A}\left[\left|\begin{matrix}[\nu_1]a^{f_1}\\ \sigma_1\mu_1S_1T_1\end{matrix}\right\rangle_{\omega_0^1}\left|\begin{matrix}[\nu_2]a^{f_2}\\ \sigma_2\mu_2S_2T_2\end{matrix}\right\rangle_{\omega_0^2}\right]^{[\sigma]ST}$$

$$=\sum_{\tilde{\nu}\alpha\mu\varphi\beta}C^{[\tilde{\nu}],\alpha[\sigma][\mu]\varphi}_{\tilde{\nu}_1\sigma_1\mu_1,\tilde{\nu}_2\sigma_2\mu_2}C^{[\mu]\varphi,\beta ST}_{\mu_1S_1T_1,\mu_2S_2T_2}\left|\begin{matrix}[\nu]a^{f_1}b^{f_2}\\ \alpha[\sigma][\mu]\beta ST\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-20a}$$

这里右边第一个因子为 $SU_{12}\supset SU_3\times SU_4\ ISF$，第二个因子为 $SU_4\supset SU_2\times SU_2\ ISF$.

对称基可用 $SU_{24}\supset SU_2\times SU_{12}(\supset SU_3\times SU_4(\supset SU_2\times SU_2))$ 母分系数展开. 利用拉卡因式分解定理以及 (7-244b) 式立即可写下：

$$\left|\begin{matrix}[\nu]w\\ \alpha[\sigma][\mu]\beta ST\end{matrix}\right\rangle=\sum\sqrt{\frac{h_{\nu'}h_{\nu''}}{h_\nu}}\,C^{[\tilde{\nu}],\alpha[\sigma][\mu]\varphi}_{\tilde{\nu}'\sigma'\mu',\tilde{\nu}''\sigma''\mu''}C^{[\sigma]w}_{\nu'w',\nu''w''}C^{[\mu]\varphi,\beta ST}_{\mu'S'T',\mu''S''T''}$$

$$\cdot\left[\left|\begin{matrix}[\nu']w'\\ \sigma'\mu'S'T'\end{matrix}\right\rangle_{1\cdots n_1}\left|\begin{matrix}[\nu'']w''\\ \sigma''\mu''S''T''\end{matrix}\right\rangle_{n_1+1\cdots n}\right]^{[\sigma]ST}. \tag{9-20b}$$

上式和号对 $\nu'\sigma'\mu'w'S'T'\nu''\sigma''\mu''w''S''T''$ 和 φ 求和. w', w''，和 w 分别为在杨图 $[\nu']$, $[\nu'']$，和 $[\nu]$ 上填入态指标 a, b 而得到的 Weyl 盘. $C^{[\nu]w}_{\nu'w',\nu''w''}$ 为 SU_2 群 CG 系数 (即轨道母分系数).

从以上讨论看到，在这些计算中，关键的系数是 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n\ ISF$.

例 计算双重子 $S=T=2$ 道物理基到对称基的变换矩阵.

由 (9-18b) 式，(9-20a) 式和 (7-238a) 式可算出表 9·3 所列的变换矩阵[1].

表 9.3 物理基和对称基之间的变换矩阵

$S=2,\ T=2$	$\left\|\begin{matrix}[51]\\ [2^3][42]\end{matrix}\right\rangle$	$\left\|\begin{matrix}[33]\\ [2^3][42]\end{matrix}\right\rangle$	$\left\|\begin{matrix}[33]\\ [2^3][6]\end{matrix}\right\rangle$	$\left\|\begin{matrix}[42]\\ [2^3][51]\end{matrix}\right\rangle$	$\left\|\begin{matrix}[42]\\ [2^3][411]\end{matrix}\right\rangle$
$(\Delta\Delta)$	$\sqrt{\frac{20}{45}}$	$-\sqrt{\frac{16}{45}}$	$-\sqrt{\frac{9}{45}}$	0	0
$(N\Delta)_1$	$\sqrt{\frac{5}{45}}$	$-\sqrt{\frac{4}{45}}$	$\sqrt{\frac{36}{45}}$	0	0
$(N\Delta)_2$	0	0	0	1	0
$(CC')_1$	$\sqrt{\frac{4}{9}}$	$\sqrt{\frac{5}{9}}$	0	0	0
$(CC')_2$	0	0	0	0	1

1) 其中的一个系数已在 § 7·16 例子中算得.

这里

$$
(N\Delta)_i=\sqrt{\frac{1}{2}}\,[\mathscr{A}(|N)|\Delta))-(-1)^i\mathscr{A}(|\Delta)|N))]
$$

$$
(CC')_i=\sqrt{\frac{1}{2}}[\mathscr{A}(|C)|C'))-(-1)^i\mathscr{A}(|C')|C))] \tag{9-20c}
$$

$$
|C)=\left|\begin{matrix}[3]\\ [21]\,[21]\,1/2,3/2\end{matrix}\right) \quad |C')=\left|\begin{matrix}[3]\\ [21]\,[21]\,3/2,1/2\end{matrix}\right)
$$

(CC')称为隐色(hidden color)道，因为三夸克团 $|C)$ 和 $|C')$ 都不是色单态，它们在色空间的对称性为[21]，但是6个夸克团处于色单态$[2^3]$。表9·3和Harvey(1981)表11一致。进一步的讨论见Chen et al (1983)。

§9.4 混合组态母分系数

假定我们考虑$(l_1)^{f_{13}}(l_2)^{f_{24}}$组态，这里$f_{13}$、$f_{24}$为$l_1$、$l_2$轨道上的核子数[见(7-212a)式]。自旋同位旋母分系数仍和纯组态情形一样，对轨道部分取$SU_{m+n}\supset(SU_m\supset SO_3)\otimes(SU_n\supset SO_3)$分类基$(m=2l_1+1,\ n=2l_2+1)$：

$$
\left|\begin{matrix}[\nu] & \beta[\sigma][\mu]\\ m,\ LM, & L_1\ \ L_2\end{matrix}\right\rangle=\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta[\sigma][\mu]L_1L_2LM\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-21}
$$

令(9-12)式中$\tau\to\beta$，$[\nu_1]\to[\sigma]$，$[\nu_2]\to[\mu]$就得到(9-21)式。

注意 勿将(9-21)式中的量子数β，$[\sigma]$，$[\mu]$和(9-13)式中的β，$[\sigma]$，$[\mu]$相混。

从l_1轨道中分出f_3个粒子，从l_2轨道中分出f_4个粒子的混合组态的母分系数定义为：

$$
(I)\equiv\left|\begin{matrix}[\nu] & \beta l_1^{f_{13}}[\sigma]l_2^{f_{24}}[\mu]\\ (\tau[\nu']m'[\nu'']m'')LM, & L_1\quad L_2\end{matrix}\right\rangle=\sum C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma][\mu]L_1L_2L}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu']L_1'L_2'L';[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']L_1''L_2''L''}
$$

$$
\cdot\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega',\ \beta' l_1^{f_1}[\sigma']l_2^{f_2}[\mu']L_1'L_2'L'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega'',\ \beta'' l_1^{f_3}[\sigma'']l_2^{f_4}[\mu'']L_1''L_2''L''\end{matrix}\right\rangle\right]^L_M. \tag{9-22}
$$

式中左边为$S_f\supset S_{f_{13}}\otimes S_{f_{24}}$分类基和$SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$分类基，这里对$\beta'\sigma'\mu'L_1'L_2'L'\beta''\sigma''\mu''L_1''L_2''L''$求和，上式中各个指标的意义见(7-262)式和(7-268)式。

下面导出(9-22)式中的混合组态母分系数的表达式。

首先将(9-22)式左边用$SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF展开

$$
(I)=\sum_{\substack{\beta'\sigma'\mu'\theta\\ \beta''\sigma''\mu''\varphi}}C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}
$$

$$
\cdot\left[\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega',\beta'[\sigma'][\mu']\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega'',\ \beta''[\sigma''][\mu'']\end{matrix}\right\rangle\right]^{[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{L_1L_2LM}. \tag{9-23a}
$$

将(9-23a)式中最后一个因子用$SU_m\supset SO_3\supset SO_2$和$SU_n\supset SO_3\supset SO_2$ CG系数展开，得

$$
(I)=\sum C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}C^{[\sigma]\theta L_1}_{[\sigma']L_1',[\sigma'']L_1''}C^{[\mu]\varphi L_2}_{[\mu']L_2',[\mu'']L_2''}
$$

$$
\cdot C^{L_1M_1}_{L_1'M_1',L_1''M_1''}C^{L_2M_2}_{L_2'M_2',L_2''M_2''}C^{LM}_{L_1M_1,L_2M_2}
$$

$$
\cdot\left|\begin{matrix}[\nu']\\ m'\omega',\beta'[\sigma'][\mu']L_1'M_1'L_2'M_2'\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu'']\\ m''\omega'',\ \beta''[\sigma''][\mu'']L_1''M_1''L_2''M_2''\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-23b}
$$

比较(9-22)式和(9-23b)式得到

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma][\mu]L_1L_2L}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu']L_1'L_2';[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']L_1''L_2''L''}$$

$$=\sum_{\theta\varphi} C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'],[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']} C^{[\sigma]\theta L_1}_{[\sigma']L_1',[\sigma'']L_1''} C^{[\mu]\varphi L_2}_{[\mu']L_2',[\mu'']L_2''} \begin{pmatrix} L_1' & L_2' & L' \\ L_1'' & L_2'' & L'' \\ L_1 & L_2 & L \end{pmatrix}. \tag{9-24}$$

即混合组态母分系数可表为 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF 和纯组态母分系数 $C^{[\sigma]\theta L_1}_{[\sigma']L_1',[\sigma'']L_1''}$, $C^{[\mu]\varphi L_2}_{[\mu']L_2',[\mu'']L_2''}$ 及 SU_2 群 $9j$ 系数的函数.

Kukulin 等给出了混合组态母分系数用 SU_{m+n} 群 9ν 系数的表达式. 由 Kukulin 的(32)式及前面 9ν 系数的性质(7-222a)式得到:

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma][\mu]L_1L_2L}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu']L_1'L_2'L';[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']L_1''L_2''L''}$$

$$=\epsilon(-1)^{f_1+f_3+f_2 f_4}\begin{pmatrix} f_{13} \\ f_3 \end{pmatrix}^{1/2}\begin{pmatrix} f_{24} \\ f_2 \end{pmatrix}^{1/2}\begin{pmatrix} f \\ f_{34} \end{pmatrix}^{-1/2}\left(\frac{h_{\sigma'}h_{\sigma''}h_{\mu'}h_{\mu''}h_{\nu}}{h_{\sigma}h_{\mu}h_{\nu'}h_{\nu''}}\right)^{1/2}\cdot$$

$$\cdot\sum_{\theta\varphi} C^{[\sigma]\theta L_1}_{[\sigma']L_1',[\sigma'']L_1''} C^{[\mu]\varphi L_2}_{[\mu']L_2',[\mu'']L_2''} \begin{pmatrix} L_1' & L_2' & L' \\ L_1'' & L_2'' & L'' \\ L_1 & L_2 & L \end{pmatrix}\begin{pmatrix} [\sigma'] & [\mu'] & [\nu'] \\ [\sigma''] & [\mu''] & [\nu''] \\ [\sigma] & [\mu] & [\nu] \end{pmatrix}^{\beta'\beta''\tau}_{\theta\varphi\beta}. \tag{9-25}$$

式中 $\epsilon=\pm1$ 为相因子. 比较(9-24)式和(9-25)式得到 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF 和 SU_{m+n} 9ν 系数的关系

$$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'[\sigma'][\mu'];[\nu'']\beta''[\sigma''][\mu'']}=\epsilon\,(-)^{f_1+f_3+f_2 f_4}\begin{pmatrix} f_{13} \\ f_3 \end{pmatrix}^{1/2}\begin{pmatrix} f_{24} \\ f_4 \end{pmatrix}^{1/2}\begin{pmatrix} f \\ f_{34} \end{pmatrix}^{-1/2}$$

$$\cdot\left(\frac{h_{\sigma'}h_{\sigma''}h_{\mu'}h_{\mu''}h_{\nu}}{h_{\sigma}h_{\mu}h_{\nu'}h_{\nu''}}\right)^{1/2}\begin{pmatrix} [\sigma'] & [\mu'] & [\nu'] \\ [\sigma''] & [\mu''] & [\nu''] \\ [\sigma] & [\mu] & [\nu] \end{pmatrix}^{\beta'\beta''\tau}_{\theta\varphi\beta}. \tag{9-26}$$

由(7-229)式、(9-26)式得到 SU_{m+n} 群 9ν 系数的一个对称性质

$$\begin{pmatrix} [\sigma'] & [\mu'] & [\nu'] \\ [\sigma''] & [\mu''] & [\nu''] \\ [\sigma] & [\mu] & [\nu] \end{pmatrix}^{\beta'\beta''\tau}_{\theta\varphi\beta}=\begin{pmatrix} [\sigma'] & [\sigma''] & [\sigma] \\ [\mu'] & [\mu''] & [\mu] \\ [\nu'] & [\nu''] & [\nu] \end{pmatrix}^{\theta\varphi\beta}_{\beta'\beta''\tau}. \tag{9-27}$$

由此得到计算 SU_{m+n} 群 9ν 系数的另一个方法: 由(7-270)式求出 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF. 然后再利用(9-26)式求得 SU_{m+n} 群的 9ν 系数.

关于如何用混合组态母分系数计算单体算符和二体算符的矩阵元可参考Kukulin 等的文章.

§9.5 核反应共振群理论的计算方法

作为群论用来处理轻核结团反应的尝试,下面讨论它在核反应共振群理论中的应用.

(9-9)式现在相当于道自旋表象波函数,根据共振群理论(Szydlik, Tang),相对运动波函数 $F(A-B)$ 由变分方程给出, 即

$$\left\langle\left[\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ L_1,\ \beta_1S_1T_1 \end{pmatrix}^{反}_{\omega_1^0}\begin{pmatrix} [\nu_2] \\ L_2,\ \beta_2S_2T_2 \end{pmatrix}^{反}_{\omega_2^0}\right]^{LST}\right| H$$

$$-E\left|\mathscr{A}\left[\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ L_1,\ \beta_1S_1T_1 \end{pmatrix}^{反}_{\omega_1^0}\begin{pmatrix} [\nu_2] \\ L_2,\ \beta_2S_2T_2 \end{pmatrix}^{反}_{\omega_2^0}F(A-B)\right]^{LST}\right\rangle=0. \tag{9-28}$$

这里上指标‘反’代表反对称波函数. 现有的共振群理论中, 将(9–28)式右方展开成各种交换项, 然后逐项计算互作用的自旋、同位旋因子. 这种方法相当麻烦, 它给不出一般表达式, 因此对每种反应, 每一个自旋 S, 总同位旋 T, 都要作繁琐的计算. 下面将对自旋同位旋因子给出一个普遍表达式, 将这些因子用置换群 CG 系数、ORC 及置换群不可约矩阵元表示出来, 简化了自旋、同位旋因子的计算, 且便于程序化.

哈密顿 H 中的互作用部分取中心势

$$V_{ij}=v(r_{ij})\Lambda_{ij},\quad \Lambda_{ij}=W-M\cdot{}^{\sigma\tau}p_{ij}+B\cdot{}^{\sigma}p_{ij}-H\cdot{}^{\tau}p_{ij}. \qquad (9\text{–}29)$$

式中 p^{σ}_{ij}, p^{τ}_{ij}, $p^{\sigma\tau}_{ij}$ 分别为自旋空间, 同位旋空间, 自旋–同位旋空间的置换算符. 计算 Λ_{ij} 矩阵元最方便的办法是取(9–14)式那种形式的反对称波函数, 即空间部分和自旋–同位旋部分各自具有确定对称性的波函数. (9–28)式中$(H-E)$右边的波函数可通过(9–16)式表为(9–14)式的线性组合. 现在进一步要把(9–28)式$(H-E)$左边的波函数表成在 f 个粒子的自旋、同位旋空间也分别具有确定对称性的波函数. 由(7–119)式得到 A、B 核反对称波函数的展开式(一些记号的意义见表 9·2)

$$\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\ L_i\beta_iS_iT_iM_i\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_im_\sigma m_\mu}\frac{\Lambda^{\nu_i}_{m_i}}{\sqrt{h_{\nu_i}}}C^{[\tilde{\nu}_i]\beta_i\tilde{m}_i}_{[\sigma_i]m_{\sigma_i},[\mu_i]m_{\mu_i}}\left|\begin{matrix}[\nu_i]\\ L_iM_i\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\sigma_i]\\ m_{\sigma_i}S_iM_{S_i}\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu_i]\\ m_{\mu_i}T_iM_{T_i}\end{matrix}\right\rangle. \qquad (9\text{–}30)$$

由(7–102b)式得

$$\left[\left|\begin{matrix}[\sigma_1]\\ m_{\sigma_1}\omega_1^0,\ S_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\sigma_2]\\ m_{\sigma_2}\omega_2^0,\ S_2\end{matrix}\right\rangle\right]^S_{M_S}=\left|\begin{matrix}[\sigma]\\ [\sigma_1]m_{\sigma_1}[\sigma_2]m_{\sigma_2},\ SM_S\end{matrix}\right\rangle \qquad (9\text{–}31\text{a})$$

$$\left[\left|\begin{matrix}[\mu_1]\\ m_{\mu_1}\omega_1^0,\ T_1\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\mu_2]\\ m_{\mu_2}\omega_2^0,\ T_2\end{matrix}\right\rangle\right]^T_{M_T}=\left|\begin{matrix}[\mu]\\ [\mu_1]m_{\mu_1}[\mu_2]m_{\mu_2},\ TM_T\end{matrix}\right\rangle \qquad (9\text{–}31\text{b})$$

(9–31)式为 $S_{f_1+f_2}\supset S_{f_1}\otimes S_{f_2}$ 分类基. 利用(4–168a)式可将它展开为 $S_{f_1+f_2}$ 的标准基. 由(9–17)式、(9–30)式、(9–31)式可将(9–28)式改写成以下形式:

$$\begin{aligned}&\sum_{\substack{m_1m_2\\ m}}\sum_{\substack{\nu\tau\\ \beta\tilde{m}}}C(m_1m_2m_\sigma m_\mu)C^{[\tilde{\nu}]\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,[\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2}\Lambda^{\tilde{\nu}}_{m}\\ &\cdot\left\langle\left[\Psi\begin{pmatrix}[\nu_1]\\ m_1\omega_1^0,\ L_1\end{pmatrix}\psi\begin{pmatrix}[\nu_2]\\ m_2\omega_2^0,\ L_2\end{pmatrix}\right]^L_M\varphi\begin{pmatrix}[\sigma]\\ m_\sigma,\ SM_S\end{pmatrix}\chi\begin{pmatrix}[\mu]\\ m_\mu,TM_T\end{pmatrix}\right|H\\ &-E\left|\Psi\begin{pmatrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\ mLM, & L_1\quad L_2\end{pmatrix}\Phi\begin{pmatrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m},\ \beta STM_SM_T\end{pmatrix}\right\rangle=0,\end{aligned} \qquad (9\text{–}32\text{a})$$

$$\begin{aligned}C(m_1m_2m_\sigma m_\mu)=&\sum_{\substack{m_{\sigma_1}m_{\mu_1}\\ m_{\sigma_2}m_{\mu_2}}}\Lambda^{\nu_1}_{m_1}\Lambda^{\nu_2}_{m_2}C^{[\tilde{\nu}_1]\beta_1\tilde{m}_1}_{[\sigma_1]m_{\sigma_1},[\mu_1]m_{\mu_1}}C^{[\tilde{\nu}_2]\beta_2\tilde{m}_2}_{[\sigma_2]m_{\sigma_2},[\mu_2]m_{\mu_2}}\\ &\cdot\left\langle\begin{matrix}[\sigma]\\ m_\sigma\end{matrix}\middle|\,[\sigma]\ \begin{matrix}[\sigma_1]\ [\sigma_2]\\ m_{\sigma_1}\ m_{\sigma_2}\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\mu]\\ m_\mu\end{matrix}\middle|\,[\mu]\ \begin{matrix}[\mu_1]\ [\mu_2]\\ m_{\mu_1}\ m_{\mu_2}\end{matrix}\right\rangle.\end{aligned} \qquad (9\text{–}32\text{b})$$

注意(9–32a)式中要对配分$[\nu]$求和. 该式中空间部分和自旋–同位旋波函数已经分开, 因此很容易计算(9–29)式中算符 Λ_{ij} 的矩阵元, 利用(9–13)式得

$$\begin{aligned}\langle m_\sigma m_\mu|\Lambda_{ij}|\tilde{\nu}\tilde{m}\beta\rangle\equiv&\left\langle\varphi\begin{pmatrix}[\sigma]\\ m_\sigma SM_S\end{pmatrix}\chi\begin{pmatrix}[\mu]\\ m_\mu TM_T\end{pmatrix}\right|\Lambda_{ij}\left|\Phi\begin{pmatrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m},\ \beta STM_SM_T\end{pmatrix}\right\rangle\\ =&WC^{[\tilde{\nu}]\beta\tilde{m}}_{[\sigma]m_\sigma,[\mu]m_\mu}-M\sum_{m'_\sigma m'_\mu}C^{[\tilde{\nu}]\beta\tilde{m}}_{[\sigma]m'_\sigma,[\mu]m'_\mu}D^{[\sigma]}_{m_\sigma m'_\sigma}(ij)D^{[\mu]}_{m_\mu m'_\mu}(ij)\\ &+B\sum_{m'_\sigma}C^{[\tilde{\nu}]\beta\tilde{m}}_{[\sigma]m'_\sigma,[\mu]m_\mu}D^{[\sigma]}_{m_\sigma m'_\sigma}(ij)-H\sum_{m'_\mu}C^{[\tilde{\nu}]\beta\tilde{m}}_{[\sigma]m_\sigma,[\mu]m'_\mu}D^{[\mu]}_{m_\mu m'_\mu}(ij)\end{aligned} \qquad (9\text{–}33\text{a})$$

令

$$(m_\sigma m_\mu|A_{ij}|\nu m)=\sum_\beta C^{[\tilde{\nu}]\tau,\beta ST}_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1S_1T_1,[\tilde{\nu}_2]\beta_2S_2T_2}\langle m_\sigma m_\mu|A_{ij}|\tilde{\nu}\tilde{m}\beta\rangle A^{\nu}_{m}. \tag{9-33b}$$

利用(9-33)式,可将(9-32a)式简化为只含空间波函数的积分微分方程

$$\sum_{\substack{m_1m_2\\m_\sigma m_\mu}}\sum_{\nu\tau}C(m_1m_2m_\sigma m_\mu)\left\langle\left[\psi\begin{pmatrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0L_1\end{pmatrix}\psi\begin{pmatrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0L_2\end{pmatrix}\right]^L_M\right|T-E$$

$$+\sum_{i>j}v(r_{ij})(m_\sigma m_\mu|A_{ij}|\nu m)\left|\Psi\begin{pmatrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\m,\ LM; & L_1\quad L_2\end{pmatrix}\right\rangle=0. \tag{9-34}$$

因此剩下的问题是计算空间积分

$$\left\langle\left[\psi\begin{pmatrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ L_1\end{pmatrix}\psi\begin{pmatrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ L_2\end{pmatrix}\right]^L_M\left|v(r_{ij})\right|\Psi\begin{pmatrix}[\nu] & \tau[\nu_1][\nu_2]\\m,\ LM; & L_1\quad L_2\end{pmatrix}\right\rangle$$

$$=\sum_{m_1m_2\omega}C^{[\nu]\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}\left\langle\psi\begin{pmatrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ L_2\end{pmatrix}\psi\begin{pmatrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ L_2\end{pmatrix}\right.$$

$$\cdot\left|v(r_{ij})\right|\left.\psi\begin{pmatrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1L_1\end{pmatrix}\psi\begin{pmatrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2,\ L_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\omega_0\\\omega\end{pmatrix}F(A-B)\right\rangle. \tag{9-35}$$

式中利用了(9-13)式以及 SO_3 群 CG 系数的幺正性.对 f 个粒子体系,一共有$\begin{pmatrix}f\\2\end{pmatrix}$个 $v(r_{ij})$ 积分,下面我们要设法减少这些积分的个数. 首先证明恒等式

$$v_{ij}=(ik)(jl)v_{kl}(ik)(jl). \tag{9-36}$$

式中(ik)等为坐标空间置换算符,$v_{ij}=v(r_{ij})$. 将上式直接作用在 x 的任一函数 $F(\cdots x_i\cdots x_j\cdots x_k\cdots x_l\cdots)$, 即可得到验证.

(1) 直接项

(9-35) 式中 $\omega_1=\omega_1^0$, $\omega_2=\omega_2^0$, $\begin{pmatrix}\omega^0\\\omega\end{pmatrix}=1$ 的项称为直接项, 这时 $(A+B)$ 系统的哈密顿可写成以下形式:

$$H=H_A+H_B+T_r+\sum_{i=1}^{f_1}\sum_{j=f_1+1}^{f}V_{ij}. \tag{9-37}$$

H_A, H_B 分别为 A、B 核的哈密顿, T_r 为相对运动动能算符. 利用(9-36)式得:

$$v_{ij}=(i,\ f_1)(j,\ f)v_{f_1f}(i,\ f_1)(j,\ f). \tag{9-38}$$

此外又有

$$(if_1)\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ L_1\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_1'}D^{[\nu_1]}_{m_1'm_1}(if_1)\left|\begin{matrix}[\nu_1]\\m_1\omega_1^0,\ L_1\end{matrix}\right\rangle,\ i=1,\ \cdots,\ f_1-1, \tag{9-39a}$$

$$(jf)\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ L_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{m_2'}D^{[\nu_2]}_{m_2'm_2}(jf)\left|\begin{matrix}[\nu_2]\\m_2\omega_2^0,\ L_2\end{matrix}\right\rangle,\ j=f_1+1,\ \cdots,\ f-1. \tag{9-39b}$$

利用(9-38)式, (9-39) 式就可把 (9-37) 式中 f_1f_2 项 v_{ij} 的积分归结为只要计算一项即 v_{f_1f} 的积分.

(2) 交换项

对交换项可类似地处理,不过问题稍为复杂一些, 一般要算好几项积分, 下面以 $f_1=3$, $f_2=2$ 为例作一说明,假定要考虑以下交换积分

$$\langle\psi^{[\nu_1]}(123)\psi^{[\nu_2]}(45)|v_{ij}|\psi^{[\nu_1]}(145)\psi^{[\nu_2]}(23)F(R_{145}-R_{23})\rangle \tag{9-40}$$

上式中 v_{ij} 的左右双方对交换(23)和(45)都有一定的对称性，$\begin{pmatrix}5\\2\end{pmatrix}=10$ 个 v_{ij} 可分成以下五种类型：

(1) v_{23}. (2) v_{45}. (3) v_{24}, v_{25}, v_{34}, v_{35}. (4) v_{14}, v_{15}. (5) v_{13}, v_{12}.

每一类型中只要计算其中的任一典型项，其它项都可通过类似于(9-38)式和(9-39)式等步骤化到所选的典型项.

这样就可把(9-34)式化到关于相对运动波函数 $F(A-B)$ 的积分、微分方程. 倘若 A、B 核的空间波函数都取高斯型，则积分核可以有分析表达式.

前面针对 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ 的讨论容易推广到超核的 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 情形. 假定相互作用满足 SU_3 对称，这时(9-28)式推广为：

$$\left\langle \left[\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ L_1\beta_1[\mu_1]S_1 \end{pmatrix}_{\omega_1^0}^{\tilde{\kappa}} \begin{pmatrix} [\nu_2] \\ L_2\beta_2[\mu_2]S_2 \end{pmatrix}_{\omega_2^0}^{\tilde{\kappa}} \right]_{IYI_zS_z}^{L[\mu]S} \right| H$$

$$-E \left| \mathscr{A} \left[\begin{pmatrix} [\nu_1] \\ L_1\beta_1[\mu_1]S_1 \end{pmatrix}_{\omega_1^0}^{\tilde{\kappa}} \begin{pmatrix} [\nu_2] \\ L_2\beta_2[\mu_2]S_2 \end{pmatrix}_{\omega_2^0}^{\tilde{\kappa}} F(A-B) \right]_{IYI_zS_z}^{L[\mu]S} \right\rangle = 0. \tag{9-41}$$

反对称波函数(9-30)式推广为[利用(9-7)式]：

$$\left| \begin{matrix} [\nu_i] \\ L_iM_i\beta_i[\mu_i]I_iY_iS_i \end{matrix} \right)$$

$$= \sum_{m_i m_{\sigma_i} m_{\mu_i}} \frac{\Lambda_{m_i}^{\nu_i}}{\sqrt{h_{\nu_i}}} C_{[\sigma_i]m_{\sigma_i},[\mu_i]m_{\mu_i}}^{[\tilde{\nu}_i]\beta_i,\tilde{m}_i} \left| \begin{matrix} [\nu_i] \\ L_iM_i \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} [\sigma_i] \\ m_{\sigma_i}S_i \end{matrix} \right\rangle \left| \begin{matrix} [\mu_i] \\ m_{\mu_i}I_iY_i \end{matrix} \right\rangle. \tag{9-42}$$

利用(9-40)式、(9-20)式，经过类似的推导，可将(9-41)式仍然化到积分微分方程(9-34)式，唯一的差别是(9-33b)式中的 $SU_4 \supset SU_2 \times SU_2$ ISF 改为 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ ISF，即

$$(m_\sigma m_\mu | A_{ij} | \nu m) = \sum_\beta C_{[\tilde{\nu}_1]\beta_1[\mu_1]S_1,[\tilde{\nu}_2]\beta_2[\mu_2]S_2}^{[\tilde{\nu}]\tau,[\mu]S} \langle m_\sigma m_\mu | A_{ij} | \tilde{\nu}\tilde{m}\beta \rangle \Lambda_m^\nu. \tag{9-43}$$

注意 在 $SU_4 \supset SU_2^s \times SU_2^t$ 情形，积分微分方程(9-34)式和 SU_2^s 及 SU_2^t 的 IR 的分量指标 M_S, M_T 无关，在 $SU_6 \supset SU_3 \times SU_2$ 情形，(9-34)式和 SU_3 及 SU_2 的 IR 分量 IYI_z, M_S 无关.

§9.6 分子壳模型

§9.1 和 §9.2 讨论了用母分系数处理原子核壳模型问题. 对分子壳模型，这里讨论另一种新的计算方法（见 Paldus 1976, Harter 1976 及文献[30, 31]），这种方法不用母分系数，而将具有确定点群对称性的多电子波函数表成酉群 Gelfand 基的线性组合，然后将哈密顿直接对角化. 这种方法的优点是便于程序化. 关于用母分系数方法处理分子壳模型的方法见文献[32].

1. 哈密顿算符和酉群无穷小算符

Moshinsky(1962) 指出：单体或二体算符可方便地表为酉群无穷小算符的函数. 单体算符 F 在二次量子化表象中可表为：

$$F = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | F | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta \tag{9-44}$$

这里 $a_\alpha^\dagger$, a_β 为产生和消灭算符，α, β 为单粒子态的标志. 由 $E_{\alpha\beta} = a_\alpha^\dagger a_\beta$[见(5-97)式]，上式

可写成

$$F=\sum_{\alpha\beta}\langle\alpha|F|\beta\rangle E_{\alpha\beta}. \tag{9-45}$$

两体算符 V 在二次量子化表象中可表为:

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma;$$

$$\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle=\int\varphi_\alpha^*(1)\varphi_\beta^*(2)V_{12}\varphi_\gamma(1)\varphi_\delta(2)d\tau_1 d\tau_2. \tag{9-46}$$

假定 $a_\alpha^\dagger(a_\gamma)$ 等为费米子产生(消灭)算符,则有

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma=-a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta=-a_\alpha^\dagger(-a_\gamma a_\beta^\dagger+\delta_{\gamma\beta})a_\delta=E_{\alpha\gamma}E_{\beta\delta}-\delta_{\gamma\beta}E_{\alpha\delta}$$

如果 $a_\alpha^\dagger(a_\gamma)$ 等为玻色子产生(消灭)算符,则有:

$$a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\delta a_\gamma=a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger a_\gamma a_\delta=a_\alpha^\dagger(a_\gamma a_\beta^\dagger-\delta_{\gamma\beta})a_\delta=E_{\alpha\gamma}E_{\beta\delta}-\delta_{\gamma\beta}E_{\alpha\delta}.$$

因此不管对费米子或玻色子均有:

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\langle\alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle E_{\alpha\gamma}E_{\beta\delta}-\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\delta}\langle\alpha\beta|V|\beta\delta\rangle E_{\alpha\delta}. \tag{9-47}$$

(9–45)式和(9–47)式把单体、两体算符都表成酉群无穷小算符的函数.

2. 自旋无关(Spin Free)近似

量子化学中自旋无关是一个好的近似 (Matsen1974, 1981). 在此近似下,上一小节中的 $\alpha,\ \beta,\ \cdots$均指轨道单粒子态(如何求这种单粒子态, 我们在§8.6中已经讨论过). 由于哈密顿 H 和自旋无关,因此最方便的方法是把多电子波函数表为坐标空间和自旋空间都具有确定置换对称性的波函数的积. 设电子数目为 f (初步近似下, f 可取为分子的价电子数. 如第八章讨论的苯分子, $f=6$. 如果按所谓"从头算" (ab initio) 方法, 则 f 为分子中所包含的所有电子数目). 一个具有确定点群对称性 $(\mu)\varkappa$(所用记号同第八章), 确定自旋 SM_S 的 f–电子反对称波函数表为:

$$\Psi(\beta\mu\varkappa,\ SM_S)=\sum_m\frac{\Lambda_m^\nu}{\sqrt{h_\nu}}\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\tilde{\nu}]\\ \tilde{m},\ SM_S\end{matrix}\right\rangle, \tag{9-48}$$

$$[\nu]=[2^{\frac{f}{2}-S},\ 1^{2S}],\quad[\tilde{\nu}]=\left[\frac{f}{2}+S,\ \frac{f}{2}-S\right]. \tag{9-49}$$

这里$[\nu]$标志 SU_n 群和 S_f 群的 IR, m 为 Yamanóuchi 数. β 为附加量子数. 在自旋无关近似下有

$$\langle\Psi(\beta\mu\varkappa,\ SM_S)|H|\Psi(\beta'\mu'\varkappa',S'M_S')\rangle=\delta_{\mu\mu'}\delta_{\varkappa\varkappa'}\delta_{SS'}\delta_{M_SM_S'}\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\end{matrix}\right|H\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta'\mu\end{matrix}\right\rangle, \tag{9-50}$$

$$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\end{matrix}\right|H\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta'\mu\end{matrix}\right\rangle=\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta\mu\varkappa\end{matrix}\right|H\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ \beta'\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-51}$$

(9–50)式右边只剩下 H 在空间波函数上的矩阵元, 其值和量子数 $m,\ \varkappa$ 无关. 自旋 S 只通过配分 $[\nu]$ [(9–49)式]表现出来.

假定在某具体问题中,我们只考虑 n 个单电子能级, 它们荷载了 U_n 群的基本表示. U_n 群 Gelfand 基 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ m,\ W\end{matrix}\right\rangle$ 构成一完备系, f–电子 $SALC$ 波函数 $\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle$ 可用它来展开

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle=\sum_W\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle \tag{9-52}$$

将(9–52)式代入(9–51)式得:

$$\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\end{matrix} \middle| H \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ \beta'\mu\end{matrix} \right\rangle = \sum_{WW'} \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ W'\end{matrix} \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ \beta'\mu\varkappa\end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu'\varkappa\end{matrix} \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix} \right\rangle \left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix} \middle| H \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ W'\end{matrix} \right\rangle. \tag{9–53}$$

上式右边 $\varkappa$ 可取任一允许值. 利用(9–45)式、(9–47)式、(7–58)式, 很容易算出矩阵元 $\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix} \middle| H \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ W'\end{matrix} \right\rangle$. 因此下面的任务是: 1. 找一个合适的群链, 用它们的 $CSCO$ 的本征值作为附加指标 β, 把不可约基 $\left| \begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\varkappa\end{matrix} \right\rangle$ 唯一确定下来. 2. 求出表象变换系数 $\left\langle \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix} \middle| \begin{matrix}[\nu]\\ \beta\mu\varkappa\end{matrix} \right\rangle$.

§9.7 一个特例——双原子分子

先讨论一个简单例子——相同原子组成的双原子分子. 由§8.2知, 这种分子具有 $D_{\infty h}$ 对称性 (见图8·2–6). $D_{\infty h}$ 群的 $CSCO$–II 列在表8·3–14. 很容易用 Galfand 基组合成具有 $D_{\infty h}$ 对称性的多电子 $SALC$ 波函数. 我们以氧分子为例, 考虑8个价电子, 占据以下6个分子轨道(Slater 1960, p. 121)

$$\begin{matrix} \sigma_g, & \pi_{u+}, & \pi_{u-}, & \pi_{g+}, & \pi_{g-}, & \sigma_u \\ a & b & c & d & e & f \end{matrix} \tag{9–54}$$

这里第一行记号的意义见表8·3–14, 即 $\sigma, \pi, \delta, \varphi, \gamma$(或 Σ, Π, Δ, Φ, Γ, 它们相当于原子光谱项记号 S, P, D, F, G)分别代表轨道角动量的 z 分量 (z 轴通过两个原子中心) 的绝对值 $|l_z|=0, 1, 2, 3, 4$ 的分子轨道. g, u 分别代表反演算符 I 的本征值为 $+1$ 和 -1. g 或 u 的下标 $+(-)$ 代表 $l_z>0(l_z<0)$. $\pm|l_z|$ 的能级是简并的. (9–54)式中第二排记号 a, b, … 为简化记号. 在反射操作 $\sigma^{(0)}=\sigma_{xz}$(即 xz 反射面)作用下, 电子矢径的方位角 $\varphi \to -\varphi$, 即 $\pi_{u+} \leftrightarrow \pi_{u-}$, $\pi_{g+} \leftrightarrow \pi_{g-}$. 由以上讨论得到在反演操作和 $\sigma^{(0)}$ 反射下有:

$$\begin{aligned} &I|a\rangle=|a\rangle,\ I|b\rangle=-|b\rangle,\ I|c\rangle=-|c\rangle,\ I|d\rangle=|d\rangle,\\ &I|e\rangle=|e\rangle,\ I|f\rangle=-|f\rangle,\\ &\sigma^{(0)}|a\rangle=|a\rangle,\ \sigma^{(0)}|b\rangle=|c\rangle, \sigma^{(0)}|d\rangle=|e\rangle,\ \sigma^{(0)}|f\rangle=|f\rangle. \end{aligned} \tag{9–55}$$

(9–54)式中的6个轨道构成 SU_6 群的基本表示. 每个分子轨道上可容纳两个电子 (自旋向上和向下). 8个电子在(9–54)式所对应的 2×6 个状态上填充, 共有 $\begin{pmatrix}12\\8\end{pmatrix}=495$ 种填法. 因此如果不利用群论, 我们要将哈密顿在由495个 Slater 行列式构成的基上对角化, 才能求出氧分子的能量. 对于稍为复杂一点的分子, 行列式的数目更是大得惊人. 利用群论分类, 可使哈密顿本征方程的阶数大大降低. 将495个态按 $D_{\infty h}$ 群的 IR 和自旋 S 进行分类, 可得到以下一个分类表(Slater 1960, p. 122).

表9·7 O_2 分子八个价电子的状态分类[1)]

	Γ_g	Φ_g	Φ_u	Δ_g	Δ_u	Π_g	Π_u	Σ_g^+	Σ_g^-	Σ_u^+	Σ_u^-
点群 IR 维数	2	2	2	2	2	2	2	1	1	1	1
$S=0$	1	2	2	8	6	10	10	12	3	6	6
$S=1$	0	2	2	5	6	12	12	4	9	6	8
$S=2$	0	0	0	1	0	2	2	2	1	0	2

1) 表中给的数值为该类状态的多重数(即出现的次数).

由(9–50)式可知，根据对称性分类后，我们只要针对每一种对称类型解哈密顿 H 的久期方程，而本例中久期方程的阶数至多不超过 12. 从这个例子可以看到，对多粒子体系，应用群论分类的重大意义，它可使 H 的久期方程的阶数降低几个数量级，使问题大大简化.

下面我们举例说明如何求具有确定点群对称性和确定自旋的多电子波函数. 考虑以下两个电子组态

(i) ab^2cde^2f　　(ii) abc^2d^2ef

根据粒子-空穴共轭，它们对应于四空穴态 $acdf$ 和 $abef$. 将四个单粒子态 a, c, d, f 或 a, b, e, f, 在 S_4 群的杨图 $[\nu]=[2^{2-S}, 1^{2S}]$ 上填充，即可得到所允许的 Weyl 盘，它们标志 SU_6 群的 Gelfand 基. 然后再将它们组合成 L_z, I 的本征函数，对 $L_z=0$ 的态(即 Σ 态)，还需进一步组合成算符 $\sigma^{(0)}$ 的本征函数. 利用(9-55)式很容易得到以下多电子 $SALC$ 波函数:

$$
{}^5\Sigma_g^{\pm}=\left|\begin{array}{|c|}\hline a\\\hline c\\\hline d\\\hline f\\\hline\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|}\hline a\\\hline b\\\hline e\\\hline f\\\hline\end{array}\right\rangle, \tag{9-56}
$$

$$
{}^3\Sigma_g^{\pm}:\ \left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & c\\\hline d\\\cline{1-1} f\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & b\\\hline e\\\cline{1-1} f\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle,\ \left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & d\\\hline c\\\cline{1-1} f\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & e\\\hline b\\\cline{1-1} f\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle,\ \left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & f\\\hline c\\\cline{1-1} d\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & f\\\hline b\\\cline{1-1} e\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle, \tag{9-57}
$$

$$
{}^1\Sigma_g^{\pm}:\ \left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & c\\\hline d & f\\\hline\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & b\\\hline e & f\\\hline\end{array}\right\rangle,\ \left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & d\\\hline c & f\\\hline\end{array}\right\rangle\pm\left|\begin{array}{|c|c|}\hline a & e\\\hline b & f\\\hline\end{array}\right\rangle. \tag{9-58}
$$

这里 Σ 的左上角为 $2S+1$ 值. 上面所考虑的组态是氧分子中最复杂的一类组态. 对其它组态可类似地处理.

Slater 1960 6–5 节用了不少篇幅讲述如何用 Slater 行列式构成上述组态的 $SALC$ 波函数. 这里采用 Gelfand 基，则很容易地就写了出来.

§9.8 纯组态情形

设 n 个分子轨道 1, 2, …, n 荷载点群 G 的 n 维 $IR(\mu)$，它们同时荷载 U_n 群的基本表示. 点群 G 是 U_n 的一个子群，我们要在 Gelfand 表象下求出 $U_n\supset G\supset G(s)$ 分类基. 下面从最简单的情形讨论起.

1. U_n 群 Gelfand 基就是点群 G 的 IR 基

(1) 亚真空态

称 U_n 群的全反对称态 $|[1^n]\rangle$ 为点群 G 的亚真空态. 类似于(7–70a)式，可以证明在点群 G 的元素 R 作用下有

$$
R|[1^n]\rangle=\det(D^{(\mu)}(R))\cdot|[1^n]\rangle. \tag{9-59}
$$

$D^{(\mu)}(R)$ 为点群 G 的不可约矩阵. 容易证明 $\det(D^{(\mu)}(R))$ 仅仅是类和不可约表示的函数，即

$$
\det(D^{(\mu)}(R))=\det(D^{(\mu)}(S)),\ 若\ R,\ S\ 属于同一类;
$$

$$
\det(D^{(\mu)}(R))=\det(\bar{D}^{(\mu)}(R)),\ 若\ \bar{D}^{(\mu)}\ 和\ D^{(\mu)}\ 等价.
$$

因此

$$\det(D^{(\mu)}(C_i))=g_i\det(D^{(\mu)}(R)),\ R\in i\ 类 \tag{9-60}$$

由(9-59)式看到，$|[1^n]\rangle$ 属于点群的一维表示. 究竟属于那个一维表示，可根据群 G 的 $OSCO$-I 的本征值来判断：

$$C|[1^n]\rangle=\begin{pmatrix}C_1\\ \vdots\\ C_l\end{pmatrix}|[1^n]\rangle=\begin{pmatrix}\det D^{(\mu)}(C_1)\\ \vdots\\ \det D^{(\mu)}(C_l)\end{pmatrix}|[1^n]\rangle. \tag{9-61}$$

例如 T_d 群，$C=6\sigma_d$，由(8-38)式得到以下 $\det D^{(\mu)}(C)$ 表

表 9.8　T_d 群的 $\det(D^{[\mu]}(C))$

(μ)	a_1	a_2	e	t_1	t_2
$\det D^{(\mu)}(C)$	6	−6	−6	6	−6

由表 9·8，表 8·3-16 立即可知对 T_d 群有：

$$\Psi^{A_2}=\left|\begin{array}{|c|}\hline e_1\\\hline e_2\\\hline\end{array}\right\rangle\equiv\left|\quad\right\rangle_e,$$

$$\Psi^{A_1}=\left|\begin{array}{|c|}\hline t_{1,1}\\\hline t_{1,2}\\\hline t_{1,3}\\\hline\end{array}\right\rangle\equiv\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_1},\quad \Psi^{A_1}=\left|\begin{array}{|c|}\hline x\\\hline y\\\hline z\\\hline\end{array}\right\rangle\equiv\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_1}, \tag{9-62}$$

以下用 $|0\rangle$ 代表亚真空态 $|[1^n]\rangle$. 由(9-49)式知，亚真空态的自旋 $S=n/2$.

(2) 真空态

称 U_n 群 Gelfand 基

$$|[2^n]\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2&2\\\hline \vdots&\vdots\\\hline n&n\\\hline\end{array}\right\rangle\equiv|0\rangle\!\rangle \tag{9-63}$$

为点群 G 的真空态. 由(9-61)式立即得到：

$$R|[2^n]\rangle=|[2^n]\rangle. \tag{9-64}$$

因此 $|[2^n]\rangle$ 构成点群 G 的恒等表示，它的自旋 $S=0$

(3) 亚单粒子态和亚单空穴态

称

$$a_i^\dagger|0\rangle=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&i\\\hline 2\\\cline{1-1} \vdots\\\cline{1-1} n\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle \tag{9-65}$$

为点群 G 的亚单粒子态，利用(9-59)式及

$$Ra_i^\dagger R^{-1}=\sum_{i'}D^{(\mu)}_{i'i}(R)a_{i'}^\dagger \tag{9-66}$$

得

$$R(a_i^\dagger|0\rangle)=(Ra_i^\dagger R^{-1})R|0\rangle=\sum_{i'}\det(D^{(\mu)}(R))\cdot D_{i'i}^{(\mu)}(R)(a_{i'}^\dagger|0\rangle). \tag{9-67}$$

因此亚单粒子态构成点群 G 的一个 n 维 IR，至于属于那一个 n 维 IR（如果有一个以上的 n 维 IR 的话），可从点群 G 的 $CSCO\text{-}II$ $(C,\ C(s))$ 的本征值来判断．为书写方便假定 $C,\ C(s)$ 均只包含一个类算符，用 $\mu,\ \varkappa$ 代表其本征值，于是有

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \end{pmatrix}|i\rangle=\begin{pmatrix} \mu \\ \varkappa_i \end{pmatrix}|i\rangle \tag{9-68}$$

由(9-67)式、(9-68)式得：

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \end{pmatrix}a_i^\dagger|0\rangle=\begin{pmatrix} \mu' \\ \varkappa_i' \end{pmatrix}a_i^\dagger|0\rangle, \tag{9-69a}$$

$$\begin{aligned}\mu'&=\mathrm{Det}(D^{(\mu)}(R))\cdot\mu,\ R\in C\\ \varkappa_i'&=\mathrm{Det}(D^{(\mu)}(R_S))\cdot\varkappa_i,\ R_S\in C(s).\end{aligned} \tag{9-69b}$$

称 $a_i|0\rangle$ 为点群 G 的亚空穴态，它属于 U_n 群的 n 维 $IR[1^{n-1}]$．将(9-66)式取厄密共轭得：

$$Ra_iR^{-1}=\sum_{i'}[D_{i'i}^{(\mu)}(R)]^*a_{i'} \tag{9-70}$$

比较 (9-66) 式和 (9-70) 式可知，当 $IR\ D^{(\mu)}$ 为实表示时（点群中大多数情形都满足这一条件），亚单空穴态 $a_i|0\rangle$ 和亚单粒子态 $a_i^\dagger|0\rangle$ 的变换性质完全一样．由(9-49)式知，亚单粒子和亚单空穴态的自旋 $S=(n-1)/2$.

例如对 T_d 群的 $(t_1)^4$ 组态或 $(t_2)^4$ 组态，$C(s)=(C_2^z,\ C_2^y)$，

$$\det(D^{(t_i)}(C_2^z))=\det(D^{(t_i)}(C_2^y))=1. \tag{9-71}$$

由(9-69)式、(9-71)式及表 8.3-16 可知

$$\begin{aligned}
\Psi_1^{T_1}&=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\quad \left|\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i};\\
\Psi_2^{T_1}&=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\quad -\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}^{1)};\quad i=1,\ 2\\
\Psi_3^{T_1}&=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\quad \left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}.
\end{aligned} \tag{9-72}$$

(4) 单空穴态

称 $a_i|0\rangle\!\rangle$ 为点群 G 的单空穴态，它属于 U_n 群 $IR[1^n1^{n-1}]$．在 $D^{(\mu)}(G)$ 为实矩阵条件下，它和单粒子态 $|[1]\rangle=a_i^\dagger|\rangle$ 的变换性质一样，$|\rangle$ 代表一个粒子也没有的真空态．例如：

1) 负号来源于：$a_2|\rangle=a_2a_1^\dagger a_2^\dagger a_3^\dagger|\rangle=-a_1^\dagger a_3^\dagger|\rangle=-\left|\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 3\\\hline\end{array}\right\rangle$.

$$\Psi_1^E=-\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_e,\qquad \Psi_2^E=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_e$$

$$\Psi_1^{T_i}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\ \Psi_2^{T_i}=-\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\ \Psi_3^{T_i}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_i},\ i=1,\ 2 \tag{9-73}$$

2. 一般情形

一般情形下要将 Gelfand 基按(9–52)式线性组合成点群 IR 基. (9–52)式中 β 为多重性指标,如果只考虑 32 种晶体点群,则在纯组态情形下指标 β 是多余的,以下略去. (9–52)式的幺正变换系数满足本征方程

$$\sum_W\left[\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W'\end{matrix}\right|\begin{matrix}C\\C(s)\end{matrix}\left|\begin{matrix}[\nu]\\W\end{matrix}\right\rangle-\begin{pmatrix}\mu\\\varkappa\end{pmatrix}\delta_{WW'}\right]\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu]\\\mu\varkappa\end{matrix}\right\rangle=0. \tag{9-74}$$

为了求出点群 G 的 $CSCO\text{–}II(C,\ C(s))$ 的矩阵元. 须先知道点群操作 R 的矩阵元. 利用(7–94a)式容易计算 R 对 Gelfand 基的作用:

$$R\left|\begin{matrix}[\nu]\\W\end{matrix}\right\rangle=(R^{[\nu]k}(\omega))^{-1}\mathring{P}^{[\nu]k}R|\omega\rangle. \tag{9-75}$$

这里利用点群操作 R 和置换算符可对易的性质, 将 R 搬到了正序态 $|\omega\rangle=|i_1i_2\cdots i_f\rangle$ 之前. 此外

$$\begin{aligned}R|\omega\rangle=R|i_1i_2\cdots i_f\rangle&=\sum_{i_1'\cdots i_f'}D^{(\mu)}_{i_1'i_1}(R)D^{(\mu)}_{i_2'i_2}(R)\cdots D^{(\mu)}_{i_f'i_f}|i_1'i_2'\cdots i_f'\rangle\\&=\sum_{\omega'}b_{\omega'}|\widetilde{\omega}'\rangle=\sum_{\omega'}b_{\omega'}p_{\omega'}|\omega'\rangle.\end{aligned} \tag{9-76}$$

式中 $b_{\omega'}$ 为系数, $|\widetilde{\omega}'\rangle$ 代表非正序态 $|i_1'i_2'\cdots i_f'\rangle$, $|\omega'\rangle$ 为和 $|\widetilde{\omega}'\rangle$ 相对应的正序态, $p_{\omega'}$ 为置换算符,它把非正序态 $|\widetilde{\omega}'\rangle$ 变到正序态 $|\omega'\rangle$. 将(9–76)式代入(9–75)式,得

$$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\W'\end{matrix}\right|R\left|\begin{matrix}[\nu]\\W\end{matrix}\right\rangle=\sum_{k'\omega'}{}'\,b_{\omega'}\,\frac{R^{[\nu]k'}(\omega')}{R^{[\nu]k}(\omega)}D^{[\nu]}_{kk'}(p_{\omega'}). \tag{9-77}$$

式中 $D^{[\nu]}_{kk'}(p_{\omega'})$ 为 S_f 群 IR 矩阵元,带撇和号表示只对那些给出同一个 W' 盘的 k' 和 ω' 求和.

求出 $C, C(s)$ 的矩阵元后, 求多电子 $SALC$ 的方法就和单电子 $SALC$ 的完全一样. 作为例子下面给出 T_d 群 $f=2,\ 3$ 时的 $SALC$ 波函数.

$$\begin{aligned}
&\Psi^{A_1}=\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline\end{array}\right\rangle_e+\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline\end{array}\right\rangle_e\\
&\Psi_1^E=-\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline\end{array}\right\rangle_e+\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline\end{array}\right\rangle_e,\quad \Psi_2^E=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline\end{array}\right\rangle_e;\\
&\Psi_1^{T_i}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i},\quad \Psi_2^{T_i}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i},\quad \Psi_3^{T_i}=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i};\ i=1,\ 2\\
&\Psi_1^E=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}-\sqrt{\tfrac{1}{6}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}-\sqrt{\tfrac{1}{6}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i};\\
&\Psi_2^E=\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}-\sqrt{\tfrac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i};\ i=1,\ 2\\
&\Psi^{A_1}=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}+\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}+\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\\hline\end{array}\right\rangle_{t_i}\right).
\end{aligned} \tag{9-78}$$

以上粒子数 $f=2$ 的结果也可以利用 T_d 群 CG 系数 (见(8-56)式及 Koster 1963) 而得到. 对 $f=3$ 的情形有:

$$
\begin{aligned}
&\Psi_1^E=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\quad \Psi_2^E=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2};\quad \Phi_1^E=\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\quad \Phi_2^E=-\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\\
&\Psi_1^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}-(-1)^i\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\\
&\Psi_2^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}+(-1)^i\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\\
&\Psi_3^{T_1}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}-(-1)^i\sqrt{\frac{1}{2}}\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2},\qquad (9\text{-}79)\\
&\Psi_1^{T_2}=-\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}+(-1)^i\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}\right),\\
&\Psi_2^{T_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}-(-1)^i\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&3\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}\right),\\
&\Psi_3^{T_2}=\sqrt{\frac{1}{2}}\left(\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 1&1\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}+(-1)^i\left|\begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\right\rangle_{t_2}\right).
\end{aligned}
$$

对点群三维 IR, 粒子数 $f=4$, 5 分别等价于两空穴和单空穴态, 因此以上结果就给出 T_d 群纯组态情形全部所要的变换系数.

Дяткина(p. 143) 也介绍了和(9-72)式、(9-78)式对应的多电子 $SALC$ 波函数的求法. 她是用特征标分解的方法将 Slater 行列式线性组合成 $SALC$ 的. 这种方法较麻烦, 推广到更多粒子的情形, 困难将更大.

§9.9 混合组态情形

1. 二重混合组态 $(\mu_1)^{f_1}(\mu_2)^{f_2}$.

设有 $m=h_{\mu_1}$ 和 $n=h_{\mu_2}$ 个分子轨道分别荷载点群 G 的 $IR(\mu_1)$ 和 (μ_2). 如果直接用群链 $U_{m+n}\supset G\supset G(s)$ 将基分类, 这时多重性问题不易解决. 我们可引进以下群链将 IR 基分类.

$$U_{m+n}\supset((U_m\supset G)\otimes(U_n\supset G))\supset G\supset G(s) \tag{9-80a}$$

此群链也可记为

$$\begin{array}{c}U_{m+n}\supset U_m\otimes U_n\supset G\supset G(s)\\ \quad\;\;\cup\qquad\;\cup\qquad\qquad\qquad\\ \quad\;\;G\;\;\times\;\;G\qquad\qquad\qquad\end{array} \tag{9-80b}$$

对应的分类基表为

$$\left|\begin{matrix}[\nu]\ [\nu_1]\,[\nu_2]\\ \mu\kappa,\ \mu_1\ \ \mu_2\end{matrix}\right\rangle\equiv\left|\begin{matrix}[\nu]\\ [\nu_1]\,[\nu_2]\,\mu_1\mu_2\mu\kappa\end{matrix}\right\rangle \tag{9-81}$$

上式可和(9-22)式相对照. 这种分类基很容易变换到 Gelfand 基. 为此首先用点群 CG 系

数 $C^{\mu\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}$ 将(9-81)式用 $U_{m+n}\supset(U_m\supset G\supset G(s))\otimes(U_n\supset G\supset G(s))$ 分类基展开

$$\left|\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \mu_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{\varkappa_1\varkappa_2}C^{\mu\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\left|[\nu];\ \begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu_1\varkappa_1, & \mu_2\varkappa_2\end{matrix}\right\rangle \tag{9-82}$$

再利用(9-52)式，将 $U_m\supset G\supset G(s)(U_n\supset G\supset G(s))$ 分类基用 $U_m(U_n)$ Gelfand 基展开

$$\left|[\nu];\ \begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu_1\varkappa_1, & \mu_2\varkappa_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_{W_1W_2}\left\langle\begin{matrix}[\nu_1] \\ W_1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu_1] \\ \mu_1\varkappa_1\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_2] \\ W_2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu_2] \\ \mu_2\varkappa_2\end{matrix}\right\rangle\left|[\nu];\ \begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_2] \\ W_1 & W_2\end{matrix}\right\rangle. \tag{9-83}$$

利用(7-144)式将上式右边最后一个因子用 U_{m+n} 的 Gelfand 基展开，最后得到

$$\left|\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \mu_2\end{matrix}\right\rangle=\sum_W\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \mu_2\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right\rangle, \tag{9-84a}$$

$$\begin{aligned}&\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \mu_2\end{matrix}\right\rangle \\ &=\sum_{W_1W_2\varkappa_1\varkappa_2}C^{\mu\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}\left\langle\begin{matrix}[\nu_1] \\ W_1\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu_1] \\ \mu_1\varkappa_1\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_2] \\ W_2\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu_2] \\ \mu_2\varkappa_2\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\ \begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_2] \\ W_1 & W_2\end{matrix}\right\rangle.\end{aligned} \tag{9-84b}$$

(9-84a)式和(9-52)式相比较，可看到 $[\nu_1]\mu_1[\nu_2]\mu_2$ 起着附加量子数 β 的作用. (9-84b)式就是我们要求的表象变换系数. 上式右方头一个因子为点群 CG 系数，第二、三个因子为纯组态时的变换系数，第四个因子为 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基到 SU_{m+n} Gelfand 基的表象变换系数. 所有这些均为已知.

2. 多重混合组态

量子化学中常见的多重混合组态是：有 m, n 个分子轨道分别属于点群 G 的 $IR(\mu_1)$ 和 (μ_2)，另有 l 个分子轨道，其中每个都构成群 G 的一维表示. 类似于(9-80)式，现在取群链

$$\begin{matrix}U_{m+n+l}\supset((U_{m+n}\supset U_m\otimes U_n)\otimes U_l)\supset G\supset G(S) \\ \quad\quad\quad\ \cup\qquad\ \ \cup\quad\ \cup\qquad\ \cup \\ \quad\quad\quad\ G\qquad\ \ G\quad\ G\qquad\ G\end{matrix} \tag{9-85}$$

对应的分类基记为

$$\left|\begin{matrix}[\nu] \\ \mu\varkappa,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_3] \\ [\nu_1][\nu_2]\mu_1\mu_2\mu_{12}, & \beta_3\mu_3\end{matrix}\right)\right\rangle \tag{9-86}$$

它属于 $\begin{matrix}U_m\supset G & U_n\supset G & U_{m+n}\supset G & U_l\supset G & U_{m+n+l}\supset G\supset G(s) \\ [\nu_1][\mu_1], & [\nu_2][\mu_2], & [\nu_{12}][\mu_{12}], & [\nu_3][\mu_3], & [\nu]\quad[\mu]\quad\varkappa\end{matrix}$ 表示. 由于 l 个分子轨道全为一维表示，所以 U_l 群 Gelfand 基一定是点群 G 的一维 $IR(\mu_3)$ 的基，即

$$\left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ \beta_3\mu_3\end{matrix}\right\rangle=\delta_{\beta_3W_3}\left|\begin{matrix}[\nu_3] \\ W_3\end{matrix}\right\rangle \tag{9-87}$$

这里就选 Weyl 盘 W_3 作为多重性指标 β_3. 而 $(\mu)=(\mu_{12})\times(\mu_3)$. 利用(9-84a)式、(9-87)式得到分类基(9-86)式到 U_{m+n+l} Gelfand 基 $\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right\rangle$ 的表象变换系数：

$$\begin{aligned}&\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu] \\ \mu\varkappa,\end{matrix}\left(\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_3] \\ [\nu_1][\nu_2]\mu_1\mu_2\mu_{12}, & \beta_3\mu_3\end{matrix}\right)\right\rangle \\ &=\delta_{\beta_3W_3}C^{\mu\varkappa}_{\mu_{12}\varkappa_{12},\mu_3\varkappa_3}\sum_{W_{12}}\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\middle|[\nu],\ \begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_3] \\ W_{12} & W_3\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_{12}] \\ W_{12}\end{matrix}\middle|\begin{matrix}[\nu_{12}] & [\nu_1] & [\nu_2] \\ \mu_{12}\varkappa_{12}, & \mu_1 & \mu_2\end{matrix}\right\rangle.\end{aligned} \tag{9-88}$$

由于 (μ_3) 为点群的一维 IR, 所以上式中量子数 $\varkappa_3$ 是多余的. 上式右面最后一个因子的表达式由(9–84b)式给出.

当只有属于 $IR(\mu_1)$ 的 m 个分子轨道和另外 l 个分子轨道, 其中每个都构成群 G 的一维表示时, 可令(9–85)式中的 $n=0$, (9–88)式中的 $[\nu_2]=[0]$, 得到

$$\left|\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_3] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \beta_3\mu_3\end{matrix}\right\rangle=\sum_W\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_3] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \beta_3\mu_3\end{matrix}\right\rangle\left|\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right\rangle, \tag{9–89a}$$

$$\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu] & [\nu_1] & [\nu_3] \\ \mu\varkappa, & \mu_1 & \beta_3\mu_3\end{matrix}\right\rangle=\delta_{\beta_3,W_3}C^{\mu\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_3\varkappa_3}\sum_W\left\langle\begin{matrix}[\nu] \\ W\end{matrix}\right|[\nu],\left.\begin{matrix}[\nu_1] & [\nu_3] \\ W_1 & W_3\end{matrix}\right\rangle\left\langle\begin{matrix}[\nu_1] \\ W_1\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[\nu_1] \\ \mu_1\varkappa_1\end{matrix}\right\rangle. \tag{9–89b}$$

§ 9.10 例子 T_d 群 $e(t_2)^2$ 组态

我们要在 Gelfand 表象下求 T_d 群 $e(t_2)^2$ 组态, 自旋 $S=\frac{1}{2}$ 的 3–电子 $SALC$ 波函数. 现在 $f=3$, 维数 $m=2$, $n=3$; e 规道只有一个电子, 所以 $[\nu_1]=[1]$, $\mu_1=E$; 由 $S=\frac{1}{2}$, $f=3$ 知 $U_{m+n}=U_5$ 群的 IR $[\nu]=[21]$. 单粒子态顺序由小到大取为 e_1, e_2, $t_{2,1}$, $t_{2,2}$, $t_{2,3}=1$, 2, x, y, z. 由 (9–84b) 式、(9–72) 式、(9–78) 式、(7–146) 式很容易算出展开系数 $\left\langle\begin{matrix}[21] \\ W\end{matrix}\right|\left.\begin{matrix}[21] & [1] & [\nu_2] \\ \mu\varkappa, & E & \mu_2\end{matrix}\right\rangle$. 结果列在表 9·10–1 至 9·10–4.

表 9·10–1

μ, $\varkappa$	$[\nu_2]\mu_2$	$1x$ x	$1y$ y	$1z$ z	$2x$ x	$2y$ y	$2z$ z
A_1	$[2]E$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
A_2	$[2]E$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$
E,1	$[2]E$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0
E,2	$[2]E$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$-\sqrt{\frac{1}{12}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$
E,1	$[2]A_1$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	0	0	0
E,2	$[2]A_1$	0	0	0	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$

表 9·10–2

μ, $\varkappa$	$[\nu_2]\mu_2$	$1y$ z	$1z$ y	$2y$ z	$2z$ y
T_1,1	$[2]T_2$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$
T_1,1	$[11]T_1$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{1}{4}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$
T_2,1	$[2]T_2$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{3}{4}$
T_2,1	$[11]T_1$	$-\frac{3}{4}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{1}{4}$

表 9·10-3

$\mu, \varkappa$	$[\nu_2]\mu_2$	$\begin{matrix}1x\\z\end{matrix}$	$\begin{matrix}1z\\x\end{matrix}$	$\begin{matrix}2x\\z\end{matrix}$	$\begin{matrix}2z\\x\end{matrix}$
$T_1, 2$	$[2]T_2$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$
$T_1, 2$	$[11]T_1$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{1}{4}$	$-\frac{3}{4}$	$\frac{\sqrt{3}}{4}$
$T_2, 2$	$[2]T_2$	$-\frac{1}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{3}{4}$
$T_2, 2$	$[11]T_1$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$-\frac{\sqrt{3}}{4}$	$\frac{1}{4}$

表 9·10-4

$\mu, \varkappa$	$[\nu_2]\mu_2$	$\begin{matrix}1x\\y\end{matrix}$	$\begin{matrix}1y\\x\end{matrix}$	$\begin{matrix}2x\\y\end{matrix}$	$\begin{matrix}2y\\x\end{matrix}$
$T_1, 3$	$[2]T_2$	0	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$
$T_1, 3$	$[11]T_1$	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$
$T_2, 3$	$[2]T_2$	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	0	0
$T_2, 3$	$[11]T_1$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0

第十章 空 间 群[1)]

由于固体中存在不能忽略的晶体结构，使得固体物理的理论很难离开空间群这个数学工具. 在与完整晶体有关的问题中，哈密顿量在空间群算符的作用下是不变的，因此空间群的不可约表示指标可用来标志一个粒子或准粒子在晶体中的能级，标志结晶体中的电子能带和声子色散曲线. 此外掌握了空间群的 IR 及其基矢的性质，就能了解哈密顿量本征解的一些性质，并大大简化哈密顿量本征态的求解过程.

空间群表示论要比点群表示论复杂得多. 这方面的工作是 1936 年由 Seitz 开始的. 经过很多科学家的极其细致的工作，230 个空间群的不可约表示都已求得，并给出了系统的表格 (Kovalev 1965, Bradley 和 Cracknell 1972).

本章将采用一种既简单而又严格的方法来介绍空间群表示论. 使读者不仅能很快掌握空间群表示的一般理论，并且能在不使用表格的情况下，用本征函数法求空间群的不可约表示. 我们将看到，求空间群 IR 矩阵的 IR 基的问题，最后归结为将一个有限群 (它是点群的覆盖群) 的至多为 48 维的表示约化，因此和求点群 IR 问题一样简单. 而求空间群的特征标归结为将至多为 11 阶的矩阵对角化，虽然 230 个空间群的 IR 矩阵已有系统的表格，但将这些表格输入到计算机，再作物理上所需要的计算也还是较麻烦的. 最好能有一个简单而普适的程序，让机器自动算出这些表格. 此外如果这些表格有错，一般人也很难检查. 至于空间群的 CG 系数，则至今还只有一些零星的数值表. 因此给出一个既便于手算也便于程序化的方法来求空间群的 IR 和 CG 系数仍然是很必要. 下面可以看到，本征函数法是处理空间群表示的一种十分有效的方法.

§10.1 欧几里德群

1. 欧几里德群的定义

设 R_3 为实三维欧氏空间. 我们寻找 R_3 上保持任意两点之间距离不变的变换 E，即

$$|E\boldsymbol{x}-E\boldsymbol{y}|=|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|. \tag{10-1}$$

E 称为等距变换. 所有这些变换形成一个集合 $E(3)$. 若定义 $E(3)$ 集合中的乘法为相继进行等距变换，则容易证明 $E(3)$ 是一个群，称为三维空间中的欧几里德群.

在 $E(3)$ 的元素中最简单的群元是平移 T_a,

$$T_a\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}, \tag{10-2}$$

即在 T_a 作用下，R_3 中每一点移动 $\boldsymbol{a}$. 所有的平移算符 T_a 构成 $E(3)$ 的一个子群 $T(3)$，称为平移群. 因为

$$T_aT_b=T_bT_a=T_{a+b}, \tag{10-3}$$

因此平移群是阿贝尔群. 显然 $T_a^{-1}=T_{-a}$.

容易求出群元 T_a 所对应的平移算符. 先考虑在 x 方向作一无穷小平移 δx. 在 $T_{\delta x}$ 作

1) 本章是在马光群和高美娟同志合作下写成的.

用下，波函数 $\psi(x)$ 变成

$$\psi'(x)=T_{\delta x}\psi(x)=\psi(T_{\delta x}^{-1}x)=\psi(x-\delta x)$$
$$\cong\psi(x)-\frac{\partial\psi}{\partial x}\delta x\cong e^{-\delta x\frac{\partial}{\partial x}}\psi. \tag{10-4}$$

由此可推得有限平移 $\boldsymbol{a}$ 所对应的算符为

$$T_{\boldsymbol{a}}=e^{-\boldsymbol{a}\cdot\nabla}=e^{-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{a}}. \tag{10-5}$$

这里 $\hat{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{i}\boldsymbol{\Delta}$ 为动量算符（取普朗克常数 $\hbar=1$）.（比较转动算符的表达式 $R_{\boldsymbol{n}}(\varphi)=e^{-i\varphi\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{n}}$）.

2. 欧几里德群算符的一些性质

现在研究 $E(3)$ 中的任一元素 E. 假定 $E\phi=\boldsymbol{a}$, 这里 $\phi=(0, 0, 0)$ 为坐标原点. 于是 $T_{-\boldsymbol{a}}E\phi=\phi$, 即 $T_{-\boldsymbol{a}}E$ 是 $E(3)$ 中保持原点不变的操作，记为 $\alpha=T_{-\boldsymbol{a}}E$. 所有使原点不变的等距变换构成我们所熟悉的三维正交群 $O(3)$. 由于 $\alpha=T_{-\boldsymbol{a}}E$, 所以 $E(3)$ 中任一群元可唯一地写成

$$E=T_{\boldsymbol{a}}\alpha. \tag{10-6a}$$

习惯上常用所谓 Seitz 记号 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 代表 $E(3)$ 的一个群元 E, 用 $\{\epsilon|0\}$ 代表幺元素，$\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}$ 代表平移算符 $T_{\boldsymbol{a}}$. 于是(10–6a)式可写成

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\{\alpha|0\},\ \{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\in T(3),\ \{\alpha|0\}\in O(3). \tag{10-6b}$$

$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 对任一矢量 $\boldsymbol{x}$ 的作用为

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\boldsymbol{x}=\alpha\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}, \tag{10-7}$$

即将 $\boldsymbol{x}$ 点绕原点转动 α 后，再作平移 $\boldsymbol{a}$. 利用

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta|\boldsymbol{b}\}\boldsymbol{x}=\{\alpha|\boldsymbol{a}\}(\beta\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b})=\alpha\beta\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}, \tag{10-8}$$

得到群元乘法规则

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta|\boldsymbol{b}\}=\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\}. \tag{10-9}$$

令上式中的 $\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\}=\{\epsilon|0\}$, 得到 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 的逆元素

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}^{-1}=\{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\boldsymbol{a}\}. \tag{10-10}$$

由(10–9)式得到

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\{\alpha|0\}=\{\alpha|0\}\{\epsilon|\alpha^{-1}\boldsymbol{a}\}. \tag{10-11}$$

因此平移和转动（包括反射）一般不对易，除非平移矢量 $\boldsymbol{a}$ 平行于转轴，或平行于反射面. 即

$$[\{\epsilon|\boldsymbol{a}\},\ \{\alpha|0\}]=0,\ \text{当 } \boldsymbol{a} \text{ 平行于 } \alpha \text{ 的转轴}, \tag{10-12a}$$
$$[\{\epsilon|\boldsymbol{a}\},\ \{\sigma|0\}]=0,\ \text{当 } \boldsymbol{a} \text{ 平行于反射面 } \sigma. \tag{10-12b}$$

由(10–9)式还可得到

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\}=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\{\alpha|\boldsymbol{b}\}=\{\alpha|\boldsymbol{b}\}\{\epsilon|\alpha^{-1}\boldsymbol{a}\}. \tag{10-13}$$

用新的记号，(10–5)可重写成

$$\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}=e^{-\boldsymbol{a}\cdot\nabla}=e^{-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{a}}. \tag{10-14}$$

下面我们考虑群操作 $\{C_{\boldsymbol{k}}(\theta)|\boldsymbol{a}\}$, $C_{\boldsymbol{k}}(\theta)$ 代表绕通过原点的 $\boldsymbol{k}$ 轴转 θ 角. 先假定 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{a}$ 垂直. 让我们来找出 $\{C_{\boldsymbol{k}}(\theta)|\boldsymbol{a}\}$ 的等价操作. 设 $\{\epsilon|\boldsymbol{b}\}$ 为一平移操作，按乘法规则有

$$\{\epsilon|-\boldsymbol{b}\}\{C_{\boldsymbol{k}}(\theta)|\boldsymbol{a}\}\{\epsilon|\boldsymbol{b}\}=\{C_{\boldsymbol{k}}(\theta)|\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}+C_{\boldsymbol{k}}(\theta)\boldsymbol{b}\}. \tag{10-15}$$

若矢量 $\boldsymbol{b}$ 满足

$$\boldsymbol{b}-C_{\boldsymbol{k}}(\theta)\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a} \tag{10-16}$$

则由(10–15)式得

$$\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}\} = \{\epsilon\,|\,\boldsymbol{b}\}\{C_k\,|\,0\}\{\epsilon\,|\,-\boldsymbol{b}\} \tag{10–17a}$$

由上式容易证明

$$\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}\}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}, \tag{10–17b}$$

即操作 $\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}\}$ 保持向量 $\boldsymbol{b}$（也即保持图 10–1 中的 ϕ' 点）不变. 因此 (10–17b) 告诉我们，绕通过原点的 $\boldsymbol{k}$ 轴转 θ 角再平移 $\boldsymbol{a}$ 等价于绕 $\boldsymbol{k}'$ 轴转 θ 角，$\boldsymbol{k}'$ 通过 ϕ' 点并和 $\boldsymbol{k}$ 平行. 矢量 $\boldsymbol{b}$ 由 (10–16) 式决定. 如图 10–1 中，P 点绕 ϕ 点转 θ 到达 P'，再平移 $\boldsymbol{a}$ 到达 P''，等价于 P 点绕 ϕ' 点转 θ 到达 P''. 若 $\boldsymbol{a}$ 是任意矢量，则可将 $\boldsymbol{a}$ 分解为平行于 $\boldsymbol{k}$ 轴的 $\boldsymbol{a}_\parallel$ 和垂直于 $\boldsymbol{k}$ 轴的 $\boldsymbol{a}_\perp$，即 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}_\parallel + \boldsymbol{a}_\perp$. 因而

$$\begin{aligned}\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}\} &= \{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}_\perp + \boldsymbol{a}_\parallel\} \\ &= \{\epsilon\,|\,\boldsymbol{a}_\parallel\}\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}_\perp\}.\end{aligned} \tag{10–18}$$

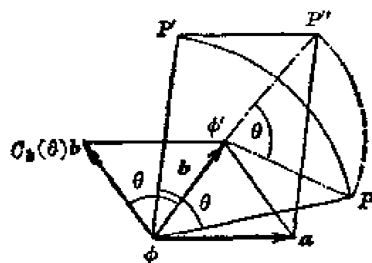


图 10–1 绕原点 ϕ 转 θ 角再平移 $\boldsymbol{a}$，等价绕 ϕ' 点转 θ 角，转轴垂直于纸面

因此通过移动转动轴，任一操作 $\{C_k(\theta)\,|\,\boldsymbol{a}\}$ 可以简化为一个单纯转动和沿转动轴方向的平移.

若平移矢量 $\boldsymbol{a}$ 和反射面 σ 相垂直，由乘法规则可得到

$$\{\sigma\,|\,\boldsymbol{a}\} = \{\epsilon\,|\,\boldsymbol{a}/2\}\{\sigma\,|\,0\}\{\epsilon\,|\,-\boldsymbol{a}/2\}. \tag{10–19}$$

因此相对于平面 σ 作反射再沿 σ 的法线方向平移 $\boldsymbol{a}$，等价于相对于平面 σ' 作反射，σ' 是将 σ 平移 $\boldsymbol{a}/2$ 而得到的一个反射面. 对于任一位移矢量 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}_\parallel + \boldsymbol{a}_\perp$（$\boldsymbol{a}_\parallel$ 和 $\boldsymbol{a}_\perp$ 分别代表跟 σ 面相平行和相垂直的矢量）有

$$\{\sigma\,|\,\boldsymbol{a}\} = \{\epsilon\,|\,\boldsymbol{a}_\parallel\}\{\sigma\,|\,\boldsymbol{a}_\perp\}. \tag{10–20}$$

因此任一操作 $\{\sigma\,|\,\boldsymbol{a}\}$ 可以简化为相对于另一平面 σ' 作反射然后沿平面方向平移 $\boldsymbol{a}_\parallel$.

§ 10.2 格群 (lattice group)

原子或离子在一空间点阵上有规则的排列就构成一个晶体. 空间点阵由满足下式的所有点 $\boldsymbol{R}_n$（称为格点 (lattice point)）所组成：

$$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{t}_1 + n_2\boldsymbol{t}_2 + n_3\boldsymbol{t}_3, \tag{10–21a}$$

或

$$\boldsymbol{R}_n = (n_1,\ n_2,\ n_3). \tag{10–21b}$$

这里 n_i 为整数，$\boldsymbol{t}_i$ 称为*初始平移矢量* (primitive translation vector)，它们必须是不共面的. $\boldsymbol{R}_n$ 称为*格矢* (lattice vector). 由 $\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$ 和 $\boldsymbol{t}_3$ 构成的平行六面体称为*元胞* (primitive cell). 空间点阵 $\{\boldsymbol{R}_n\}$ 又称为空点阵（'empty' lattice）. 注意，原子或离子不一定都位于格点上，一个元胞可包含不止一个原子或离子.

$\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$ 和 $\boldsymbol{t}_3$ 一般不互相垂直，它们的标量积即度规张量记为

$$g_{ij} = \boldsymbol{t}_i \cdot \boldsymbol{t}_j. \tag{10–22}$$

保持 $\alpha\boldsymbol{R}_n$ 仍然属于点阵 $\{\boldsymbol{R}_n\}$ 的所有转动 α 构成一个点群，记为 F，称为*空点阵* $\{\boldsymbol{R}_n\}$ *的点群*. 点群 F 必包含空间反演算符 I，这是因为若 $\boldsymbol{R}_n$ 为格矢，则 $-\boldsymbol{R}_n$ 也必为格矢.

以格矢 $\boldsymbol{R}_n$ 为平移矢量的平移群称为*格群*，记为 T

$$T = \{\epsilon\,|\,\boldsymbol{R}_n\}. \tag{10–23}$$

显然 T 为无限晶体的一个对称子群，因为晶体中的任一点 $\boldsymbol{x}$ 都等价于点 $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{R}_n$. 实际晶体当然是有限的，不过它包含为数极多(每立方厘米约 10^{20} 个)的原子. 因此当我们讨论晶体的整体性质(bulk property)时，可把它当作一个无限晶体来处理.

§10.3 空 间 群

晶体除了上述平移对称外，还有某种转动和反射对称. 晶体的完全对称群就叫做空间群，记为 G，它显然是欧几里德群的子群. 而格群又是 G 的子群，即 $E(3)\supset G\supset T$. 空间群元可表为

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}=\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\} \tag{10-24}$$

这里矢量 $\boldsymbol{v}(\alpha)$ 是与点群操作 α 相联系的，称为非初始平移. $\boldsymbol{v}(\alpha)$ 或者是零，或者是一个不是格矢的矢量. 它总是小于格矢，因为等于格矢的部分可归入格矢中去. 当然点群幺元素 ϵ 所对应的非初始平移一定为零，$\boldsymbol{v}(\epsilon)=0$.

所有的操作 α 构成一个点群 G_0，称为空间群的点群. 实际晶体是空点阵上放置了各种原子，离子，分子而成的. 由于这些离子、分子的排列以及它们本身都有其自己的对称性，因此晶体点群 G_0 的对称性将低于空点阵的点群 F，即一般说 G_0 是 F 的子群 $F\supset G_0$. 只有当这些离子、分子的排列及它们本身的对称性都大于或等于 F 时，G_0 才等于 F.

G_0 同构于商群 G/T.

根据是否有非初始平移，可将空间群分成两类. 第一类是没有非初始平移的，即对所有的 α 都有 $\boldsymbol{v}(\alpha)=0$，称为简单空间群 (simple or symmorphic space group). 这种简单空间群共有 73 个. 显然，点群 $G_0=\{\alpha\}$ 是简单空间群的子群. 第二类是至少对于一个 α 有 $\boldsymbol{v}(\alpha)\neq 0$，称为非简单 (nonsymmorphic) 空间群. 对此 α，$\{\alpha|0\}$ 以及纯平移 $\{\epsilon|\boldsymbol{v}(\alpha)\}$ 都不是空间群的元素，因此在非简单空间群中，点群 $G_0=\{\alpha\}$ 不是它的子群. 共有 157 个非简单空间群. 当 $\boldsymbol{v}(\alpha)\neq 0$ 时，若 α 代表一个转动，则 $\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)\}$ 称为一个螺旋轴 (screw axis)，若 α 代表一个反射面 σ，则 $\{\sigma|\boldsymbol{v}(\sigma)\}$ 称为滑移面(glide plane).

下面讨论对非初始平移的一些限制.

设 α 为一 n 度轴 C_n，若其非初始平移 $\boldsymbol{v}$ 与 C_n 轴平行时，由(10-12a)可知，$\{C_n|0\}$ 和 $\{\epsilon|\boldsymbol{v}\}$ 对易，于是有

$$\{C_n|\boldsymbol{v}\}^n=\{C_n^n|n\boldsymbol{v}\}=\{\epsilon|n\boldsymbol{v}\}. \tag{10-25a}$$

因此 $n\boldsymbol{v}=l\boldsymbol{R}_m$，这里 $\boldsymbol{R}_m$ 为沿 C_n 轴方向的最短格矢，而非初始平移 $\boldsymbol{v}$ 必取以下形式:

$$\boldsymbol{v}=\frac{l}{n}\boldsymbol{R}_m,\ l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ n-1. \tag{10-25b}$$

类似地利用(10-12b)可证明，若 σ 为一反射面，其非初始平移 $\boldsymbol{v}$ 和 σ 面相平行，则 $\boldsymbol{v}$ 必取以下形式

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{2}\boldsymbol{R}_m. \tag{10-25c}$$

这里 $\boldsymbol{R}_m$ 为 $\boldsymbol{v}$ 方向上的最短格矢.

在 157 个非简单空间群中，非初始平移都取以下形式

$$\boldsymbol{v}=\frac{1}{m}(m_1\boldsymbol{t}_1+m_2\boldsymbol{t}_2+m_3\boldsymbol{t}_3) \tag{10-25d}$$

$m=2, 3, 4, 6$; $m_i=0, 1, \cdots, m-1$.

空间群是一种不连续的无限群. 不过我们只要给出有限个群元 $\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)\}$ 和格矢 $\boldsymbol{R}_n$ 的形式, 也就给出了一个空间群 G.

由乘法规则

$$\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\}\{\beta|\boldsymbol{v}(\beta)+\boldsymbol{R}_m\}=\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{v}(\beta)+\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha\boldsymbol{R}_m+\boldsymbol{R}_n\}, \tag{10-26}$$

可知初始平移和非初始平移必须满足以下条件:

$$\alpha\boldsymbol{R}_m=\boldsymbol{R}_l \quad (\text{即 } \alpha\boldsymbol{R}_m \text{ 仍为一格矢}), \tag{10-27a}$$

$$\boldsymbol{v}(\alpha)+\alpha\boldsymbol{v}(\beta)=\boldsymbol{v}(\alpha\beta)+\boldsymbol{R}_l. \tag{10-27b}$$

点群操作 α 对初始平移 $\boldsymbol{t}_i$ 的作用可在 Bradley 和 Cracknell p. 84 表 3·2 中查到.

根据

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}\{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\boldsymbol{a}\}=\{\epsilon|\alpha\boldsymbol{R}_n\}, \tag{10-28}$$

以及(10-27a)式可知, 格群 T 是空间群 G 的不变子群.

§10.4 空点阵点群 F 及晶系

根据格群 T 为空间群 G 的不变子群, 可以推出对空点阵点群 F 的限制. (10-27a) 式表明, 初始平移基矢 $\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$ 和 $\boldsymbol{t}_3$ 张开点群 F 的一个三维表示

$$\alpha\boldsymbol{t}_i=\sum_{j=1}^{3}D_{ji}(\alpha)\boldsymbol{t}_j. \tag{10-29}$$

由于 $\alpha\boldsymbol{t}_i$ 属于空点阵 $\{\boldsymbol{R}_n\}$, 所以 $\alpha\boldsymbol{t}_i=n_1\boldsymbol{t}_1+n_2\boldsymbol{t}_2+n_3\boldsymbol{t}_3$. 因此上式中矩阵元 $D_{ji}(\alpha)$ 全为整数[1], 因而该表示的特征标 $\chi(\alpha)$ 也全为整数. 另一方面由 (5-32) 我们知道, 以笛卡尔基 $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$ 为基时, O_3 群的特征标为 $\chi(\varphi)=\pm1+2\cos\varphi$, φ 为绕某一轴的转动角度, $+1(-1)$ 对应于纯转动 (转动反射). 由于笛卡尔基和 ($\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$, $\boldsymbol{t}_3$) 基之间只差一个线性变换, 而特征标在相似变换下是不变的, 由此我们得到一个条件

$$\pm1+2\cos\varphi=\text{整数}. \tag{10-30}$$

这就给转动角度 φ 一个限制. 使得 φ 只能等于 2π, π, $\pm2\pi/3$, $\pm\pi/2$, $\pm\pi/3$. 这就证明了空点阵点群 G_0 的转动轴的阶只能是 1, 2, 3, 4, 6, 而不存在 5 度轴和 7 度轴等. 所以在所有点群中, 只有 32 种是满足上述条件的, 它们称为晶体点群. 它们是循环群 $\mathscr{C}_n$, $n=1$ 2, 3, 4, 6; 二面体群 D_n, $n=2, 3, 4, 6$; 四面体群 T 和八面体群 O. 加上反演或反射面则还有 $\mathscr{C}_i, S_4, S_6, \mathscr{C}_{nh}$, $n=1, 2, 3, 4, 6$; $\mathscr{C}_{nv}$ 和 D_{nh}, $n=2, 3, 4, 6$; D_{2d}, D_{3d}, T_h 和 O_h.

除了(10-30)式的限止外, 以下定理对群 F 还附加了另一种限制.

定理 若空点阵点群 F 包含一 n 度轴, $n>2$, 则它必包含于群 $\mathscr{C}_{nv}$ (证明见文献 [33]).

32 个晶体点群中, 只有以下七个能满足这一条件: $\mathscr{C}_i$, $\mathscr{C}_{2h}=\mathscr{C}_2\times\mathscr{C}_i$, $D_{2h}=D_2\times\mathscr{C}_i$, $D_{3d}=D_3\times\mathscr{C}_i$, $D_{4h}=D_4\times\mathscr{C}_i$, $D_{6h}=D_6\times\mathscr{C}_i$ 和 $O_h=O\times\mathscr{C}_i$. 它们就是所允许的空点阵点群 F. 如所预期的那样, 它们全都包含空间反演 I. 它们的从属关系为:

$$\begin{array}{c} O_h\supset D_{4h}\supset D_{2h}\supset\mathscr{C}_{2h}\supset\mathscr{C}_i \\ \qquad\qquad\quad\ \cap \qquad\ \cap \\ \qquad\qquad\quad D_{6h}\supset D_{3d} \end{array} \tag{10-31}$$

1) 虽然 α 为幺正算符, 但由于 $\boldsymbol{t}_i$ 不是正交归一基, $D(\alpha)$ 不是幺正矩阵.

如果两个空点阵具有相同的对称点群 F，则称这两个点阵是属于同一晶系的. 于是共有七个晶系：三斜系($\mathscr{C}_i$)(triclinic)，单斜系($\mathscr{C}_{2h}$)(monoclinic)，正交系(D_{2h})(orthorhombic)，三角系(D_{3d})(trigonal)，四角系(D_{4h})(tetragonal)，六角系(D_{6h})(hexagonal)和立方系(O_h)(cubic).

这七个晶系的基矢 $\boldsymbol{t}_i$ 所对应的度规张量可取以下形式：

$$\underset{\text{三斜}}{\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}} \quad \underset{\text{单斜}}{\begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & g_{33} \end{pmatrix}} \quad \underset{\text{正交}}{\begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 \\ 0 & g_{22} & 0 \\ 0 & 0 & g_{33} \end{pmatrix}} \quad \underset{\text{三角}}{\begin{pmatrix} a & b & b \\ b & a & b \\ b & b & a \end{pmatrix}}$$

$$\underset{\text{四角}}{\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}} \quad \underset{\text{六角}}{\begin{pmatrix} a & -a/2 & 0 \\ -a/2 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix}} \quad \underset{\text{立方}}{\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}} \tag{10-32}$$

§10.5 布拉菲格子(Bravais lattice)

前面说过，点阵的对称性使得其对称点群 F 只能有 $n=1, 2, 3, 4, 6$ 度轴. 反过来，点阵的对称群 F 也对点阵的类型有所限制.

定义 对属于同一个晶系的两个点阵，如果其中的一个可通过连续变形变到另一个，且在变形过程中它的对称群应不低于该晶系的对称群 F，则称这两个点阵是同型的，否则称为不同型的.

可以证明[33]，七个晶系共包含十四种类型的点阵，称为十四种 Bravais 格子或 Bravais 点阵，其几何形状及初始平移见图 10·2. 由图 10·2 给出的初始平移 $\boldsymbol{t}_i$，可求出 Bravais 格子的度规张量 g_{ij}. 例如对立方晶系有

$$g_P=\begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix},\ g_I=\frac{3}{4}\begin{pmatrix} a & -a/3 & -a/3 \\ -a/3 & a & -a/3 \\ -a/3 & -a/3 & a \end{pmatrix},\ g_F=\begin{pmatrix} a & a/2 & a/2 \\ a/2 & a & a/2 \\ a/2 & a/2 & a \end{pmatrix}. \tag{10-33}$$

可以证明，14 种类型的 Bravais 点阵 $\{\boldsymbol{R}_n\}$，32 种点群 $G_0=\{\alpha\}$，加上各种可能的非初始平移 $\boldsymbol{v}(\alpha)$，一共可构成 230 个空间群 $G=\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\}$. 32 个点群将空间群分成 32 个晶类. 点群记号加一个上标如 $\mathscr{C}_{2v}^3$, O_h^7 就用来标志空间群. 230 个空间群的标志及其生成元可参看 Bradley 和 Cracknell (1972) p. 127 表 3.7;

七个晶系所包含的点群如下：

1. 三斜晶系：$F=\mathscr{C}_i$; $G_0=\mathscr{C}_i$, $\mathscr{C}_1$.
2. 单斜晶系：$F=\mathscr{C}_{2h}$; $G_0=\mathscr{C}_{2h}$, $\mathscr{C}_2$, $\mathscr{C}_s$.
3. 正交晶系：$F=D_{2h}$; $G_0=D_{2h}$, D_2, $\mathscr{C}_{2v}$.
4. 三角晶系：$F=D_{3d}$; $G_0=D_{3d}$, D_3, $\mathscr{C}_{3v}$, $\mathscr{C}_3$, S_6.
5. 四角晶系：$F=D_{4h}$; $G_0=D_{4h}$, D_{4d}, D_4, $\mathscr{C}_{4v}$, S_4, $\mathscr{C}_4$, D_{2d}.
6. 六角晶系：$F=D_{6h}$; $G_0=D_{6h}$, D_6, $\mathscr{C}_{6h}$, $\mathscr{C}_{6v}$, $\mathscr{C}_6$, D_{3h}, $\mathscr{C}_{3h}$.
7. 立方晶系：$F=O_h$; $G_0=O_h$, O, T_d, T, T_h.

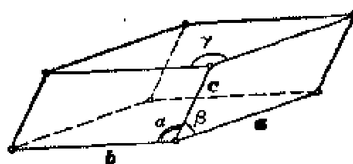
图 10·5　十四种布拉菲格子

(1) 三斜晶系

Triclinic-P(Γ_t)

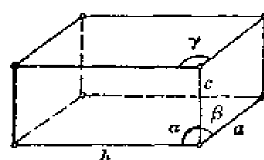
$a \neq b \neq c$

$\alpha \neq \beta \neq \gamma$



以下统一用 $\boldsymbol{a}$, b, c 代表三边边长，α 为边 $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$ 之间的夹角，β 为边 $\boldsymbol{c}$, $\boldsymbol{a}$ 之间的夹角，γ 为边 $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ 之间的夹角

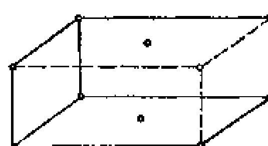
(2) 单斜晶系 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \pi/2 \neq \gamma$



简单型 Γ_m

Monoclinic-P

t_i: $(0, -b, 0)$; $(a\sin\gamma, -a\cos\gamma, 0)$; $(0, 0, c)$

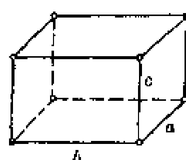


底心型 Γ_m^b

Monoclinic-B

t_i: $(0, -b, 0)$; $\frac{1}{2}(a\sin\gamma, -a\cos\gamma, -c)$; $\frac{1}{2}(a\sin\gamma, -a\cos\gamma, c)$

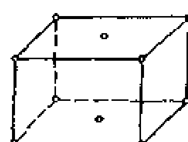
(3) 正交晶系 $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$



简单型 Γ_0

Orthorhombic-P

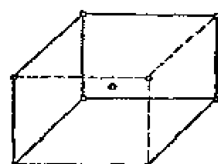
t_i: $(0, -b, 0)$; $(a, 0, 0)$; $(0, 0, c)$



底心型 Γ_0^b

Orthorhombic-C

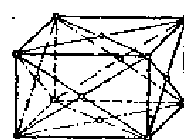
t_i: $\frac{1}{2}(a, -b, 0)$; $\frac{1}{2}(a, b, 0)$; $(0, 0, c)$.



体心型 Γ_0^v

Orthorhombic-I

t_i: $\frac{1}{2}(a, b, c)$; $\frac{1}{2}(-a, -b, c)$; $\frac{1}{2}(a, -b, -c)$.



面心型 Γ_0^f

Orthorhombic-F

t_i: $\frac{1}{2}(a, 0, c)$; $\frac{1}{2}(0, -b, c)$; $\frac{1}{2}(a, -b, 0)$

(4) 三角晶系

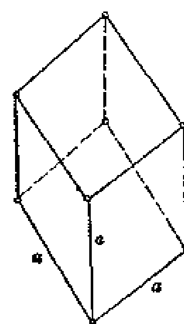
Trigonal-R (Γ_{rh})

$a = b \neq c$,

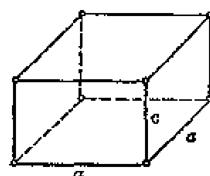
$\alpha = \beta = \gamma < 2\pi/3$,

$\alpha \neq \pi/2$

t_i: $(0, -a, c)$; $\frac{1}{2}(\sqrt{3}a, a, 2c)$; $\frac{1}{2}(-\sqrt{3}a, a, 2c)$



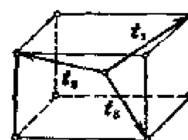
(5) 四角晶系 $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$



简单型 Γ_q

Tetragonal-P

t_i: $(a, 0, 0)$; $(0, a, 0)$; $(0, 0, c)$



体心型 Γ_q^v

Tetragonal-I

t_i: $\frac{1}{2}(-a, a, c)$; $\frac{1}{2}(a, -a, c)$; $\frac{1}{2}(a, a, -c)$

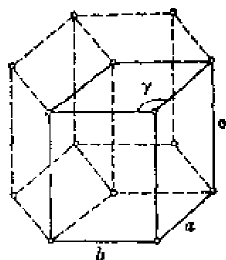
(6) 六角晶系 $a=b\neq c$, $\alpha=\beta=\pi/2$, $\gamma=2\pi/3$

Hexagonal-P, Γ_h

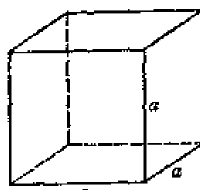
t_i: $(0, -a, 0)$;

$\frac{1}{2}(\sqrt{3}a, a, 0)$;

$(0, 0, c)$



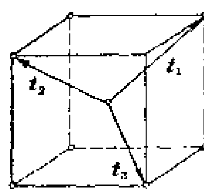
(7) 立方晶系 $a=b=c$, $\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$



简单型 Γ_c

Cubic-P

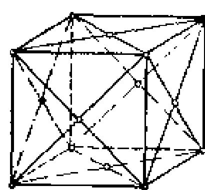
t_i: $(a, 0, 0)$; $(0, a, 0)$; $(0, 0, a)$



体心型 Γ_c^v

Cubic-I

t_i: $\frac{1}{2}(-a, a, a)$; $\frac{1}{2}(a, -a, a)$; $\frac{1}{2}(a, a, -a)$



面心型 Γ_c^f

Cubic-F

t_i: $\frac{1}{2}(0, a, a)$; $\frac{1}{2}(a, 0, a)$; $\frac{1}{2}(a, a, 0)$

§10.6 空间群的算符

1. 空间群算符的性质

首先指出，如果把欧几里德群或空间群群操作看作是坐标变换算符，则它不是线性算符。为说明这一点，只需考虑平移算符 T_a. 设

$$T_a\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}. \tag{10-34a}$$

设 $\boldsymbol{z}=C_1\boldsymbol{x}+C_2\boldsymbol{y}$, C_1, C_2 为任意常数．由(10-34a)式得

$$T_a\boldsymbol{z}=C_1\boldsymbol{x}+C_2\boldsymbol{y}+\boldsymbol{a}. \tag{10-34b}$$

如果 T_a 是线性算符，则应当有：

$$T_a\boldsymbol{z}=C_1T_a\boldsymbol{x}+C_2T_a\boldsymbol{y}=C_1\boldsymbol{x}+C_2\boldsymbol{y}+(C_1+C_2)\boldsymbol{a}. \tag{10-34c}$$

由于$(C_1+C_2)\boldsymbol{a}\neq\boldsymbol{a}$, 所以看作为坐标变换的空间群算符不是线性算符．

但如果将空间群算符定义为函数空间的取代算符，即定义

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\{\alpha|\boldsymbol{a}\}^{-1}\boldsymbol{x})=\psi(\alpha^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})), \tag{10-35}$$

则它是线性算符．说明如下．仍只考虑平移算符．若

$$T_a\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}),$$

则有：

$$T_a[C_1\psi(\boldsymbol{x})+C_2\varphi(\boldsymbol{x})]=C_1\psi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})+C_2\varphi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a})=C_1T_a\psi(\boldsymbol{x})+C_2T_a\varphi(\boldsymbol{x}).$$

由此可见 $T_a=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}$ 为线性算符．类似地可以证明，在(10-35)式定义下，空间群算符 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 为线性算符．

容易证明在上述定义下，群元算符的乘法规则和前面所述的在坐标空间的乘法规则(10-9)式是一致的．证明如下：

$$\begin{aligned}\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta|\boldsymbol{b}\}\psi(\boldsymbol{x})&=\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\psi(\beta^{-1}\boldsymbol{x}-\beta^{-1}\boldsymbol{b})=\psi(\beta^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{a}\}^{-1}\boldsymbol{x}-\beta^{-1}\boldsymbol{b})\\&=\psi(\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\}^{-1}\boldsymbol{x})=\{\alpha\beta|\alpha\boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}\}\psi(\boldsymbol{x}).\end{aligned} \tag{10-36a}$$

因此(10-9)式成立. (10-10)式—(10-20)式当然对空间群也成立.

在做上述运算时,必须十分注意以下几点:

$$\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\psi(\alpha^{-1}\boldsymbol{x})=\psi(\alpha^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}))\neq\psi(\alpha^{-1}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}) \tag{10-36b}$$

$$\{\alpha|0\}\psi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})=\psi(\alpha^{-1}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})\neq\psi(\alpha^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})). \tag{10-36c}$$

$$\{\alpha|0\}\psi(\beta^{-1}\boldsymbol{x})=\psi(\beta^{-1}\alpha^{-1}\boldsymbol{x})\neq\psi(\alpha^{-1}\beta^{-1}\boldsymbol{x}). \tag{10-36d}$$

(10-35)式可写成

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\psi(\boldsymbol{x})=\psi(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{a}'), \tag{10-37a}$$

$$\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{a}'=\alpha^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{a}). \tag{10-37b}$$

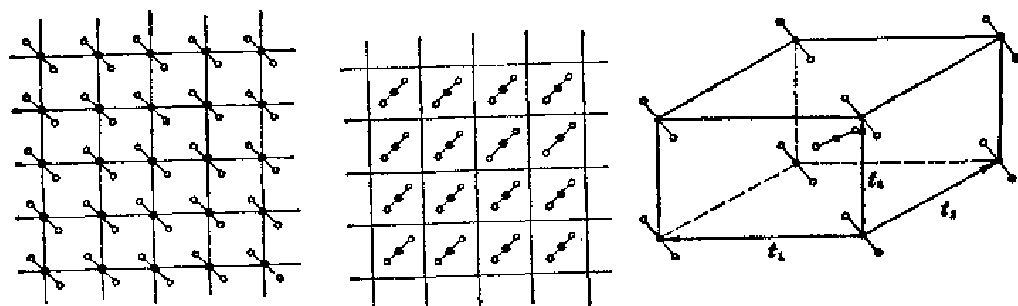
我们以后一律采用(10-37)式作为空间群算符的定义,即和 Bradley 和 Cracknell 的定义一致. (10-37b)式写成分量形式为

$$x_i'-a_i'=\sum_{j=1}^{3}D_{ji}(\alpha^{-1})(x_j-a_j)=\sum_{j=1}^{3}D_{ij}(\alpha)(x_j-a_j) \tag{10-37c}$$

这里 $D_{ij}(\alpha)$ 为点群操作 α 在以 x, y, z 为基的表示中的矩阵元.

2. 群元算符的具体形式

以空间群 D_{4h}^{14} 为例. 金红石(TiO_2)的对称群就是 D_{4h}^{14}. 为具体起见就讨论金红石, 金红石属四角晶系,每个格点上有一个 TiO_2 分子, 它的排列如图 10·6-1 所示, 每个晶胞(元胞)中平均包括两个 Ti 原子和四个 O 原子.



(a) 第 1, 3, 5, …层原子排列 (b) 第 2, 4, 6, …层原子排列图 (c) 空间群 D_{4h}^{14} 的元胞

图 10·6-1 金红石 TiO_2 的原子排列和元胞. ∘ 代表氧原子, • 代表钛原子

虽然在晶胞中心有一个 TiO_2 分子, 但金红石结构不是体心四角格子, 因为中心那个 TiO_2 分子的排列方向与角上的不同,所以金红石属简单四角格子.

金红石结构的对称操作如下:

(1) 纯平移操作 $\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}$

$$\boldsymbol{R}_n=n_1\boldsymbol{t}_1+n_2\boldsymbol{t}_2+n_3\boldsymbol{t}_3,$$

$\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$, $\boldsymbol{t}_3$ 互相垂直, 且 $t_1=t_2=a$, $t_3=c$.

(2) 属于点群 D_{2h} 的操作(见图 10·6-2):

$$D_{2h}:\ \{\epsilon|0\},\ \{C_2^z|0\},\ \{C_2^{x'}|0\},\ \{C_2^{y'}|0\},$$
$$\{I|0\},\ \{\sigma_h|0\},\ \{\sigma^{x'}|0\},\ \{\sigma^{y'}|0\}.$$

这里记号的意义同第八章, 如 I 为空间反演. σ_h 为水平反射面, $\sigma^{x'}$ 和 $\sigma^{y'}$ 为垂直反射面等.

(3) 包含非初始平移的操作

图 10·6-2　D_{2h} 群

图 10·6-3　绕 ϕ 点转 90° 再平移 $(\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2)/2$ 等价于绕 ϕ' 点转 90°

$$\{C_4^z|\boldsymbol{v}\},\ \{\overline{C}_4^z|\boldsymbol{v}\},\ \{C_2^x|\boldsymbol{v}\},\ \{C_2^y|\boldsymbol{v}\}$$

$$\{\overline{S}_4^z|\boldsymbol{v}\},\ \{S_4^z|\boldsymbol{v}\},\ \{\sigma^x|\boldsymbol{v}\},\ \{\sigma^y|\boldsymbol{v}\},\quad \boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2+\boldsymbol{t}_3).$$

这里 $\overline{C}_4^z=(C_4^z)^{-1}$, $\overline{S}_4^z=(S_4^z)^{-1}$. 根据

$$\{C_4^z|\boldsymbol{v}\}=\{\epsilon\left|\frac{1}{2}c\boldsymbol{k}\}\{C_4^z\right|\frac{a}{2}(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{j})\}=\{\epsilon\left|\frac{1}{2}c\boldsymbol{k}\}\{C_4^{z\prime}\right|0\},$$

这里 $C_4^{z\prime}$ 为绕通过图 10·6-3 中 ϕ' 点的 z 轴(记为 z' 轴)转 90°, 可知 $\{C_4^z|\boldsymbol{v}\}$ 等价于绕 z' 轴转 90° 然后再在 z 方向上平移 $c/2$. 在此操作下, 图 10·6-1 中, 第 0, 2, 4, …层就移动到原来的 1, 3, 5, …层.

(2) 和 (3) 中的点群操作部分构成 D_{4h} 群.

由(10-37)式及第八章给出的点群 IR 矩阵元 (如(8-1), (8-23)式等), 可作出空间群元对波函数的作用. 结果列在表 10.6.

表 10.6　空间群 D_{4h}^{14} 的群元对 $\psi(x, y, z)$ 的作用①

$\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}$ $\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}\psi$	$\{\epsilon\|0\}$ $\psi(x, y, z)$	$\{C_2^{x\prime}\|0\}$ $\psi(y, x, -z)$	$\{C_2^{y\prime}\|0\}$ $\psi(-y, -x, -z)$	$\{C_2^z\|0\}$ $\psi(-x, -y, z)$	$\{C_4^z\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(\eta, -\xi, \zeta)$	$\{\overline{C}_4^z\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(-\eta, \xi, \zeta)$
$\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}$ $\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}\psi$	$\{I\|0\}$ $\psi(-x, -y, -z)$	$\{\sigma^{x\prime}\|0\}$ $\psi(-y, -x, z)$	$\{\sigma^{y\prime}\|0\}$ $\psi(y, x, z)$	$\{\sigma_h\|0\}$ $\psi(x, y, -z)$	$\{\overline{S}_4^z\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(-\eta, \xi, -\zeta)$	$\{S_4^z\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(\eta, -\xi, -\zeta)$
$\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}$ $\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}\psi$	$\{C_2^x\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(\xi, -\eta, -\zeta)$	$\{C_2^y\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(-\xi, \eta, -\zeta)$	$\{\sigma^x\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(-\xi, \eta, \zeta)$	$\{\sigma^y\|\boldsymbol{v}\}$ $\psi(\xi, -\eta, \zeta)$	$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$ $\psi(x-n_1a, y-n_2a, z-n_3c)$	

① $\xi=x-1/2$, $\eta=y-1/2$, $\zeta=z-1/2$.

§10.7　倒　格　矢

$\boldsymbol{t}_1$, $\boldsymbol{t}_2$, $\boldsymbol{t}_3$ 是一组非正交归一基矢. 根据(2-15a)我们可引入一组 dual basis $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$, 使得

$$\boldsymbol{b}_i\cdot\boldsymbol{t}_j=2\pi\delta_{ij},\tag{10-38}$$

这里引进 2π 因子是为了将来方便. 容易看出, $\boldsymbol{b}_i$ 和 $\boldsymbol{t}_i$ 的关系为:

$$\boldsymbol{b}_i=2\pi(\boldsymbol{t}_j\times\boldsymbol{t}_k)/(\boldsymbol{t}_i\cdot(\boldsymbol{t}_j\times\boldsymbol{t}_k)),\ i,\ j,\ k\ \text{轮换}.\tag{10-39}$$

根据(5-12c)式可知, $\boldsymbol{t}_i$ 为共变基矢, $\boldsymbol{b}_i$ 为逆变基矢, $\boldsymbol{b}_i\cdot\boldsymbol{t}_j=2\pi\delta_{ij}$ 为不变量. 逆变基矢的度规张量记为

$$g^{ij}=\boldsymbol{b}_i\cdot\boldsymbol{b}_j.\tag{10-40}$$

根据(5-12b)，它和共变基矢的度规张量 g_{ij} 的关系为

$$\|g^{ij}\| = 4\pi^2 \|g_{ij}\|^{-1}. \tag{10-41}$$

定义

$$\boldsymbol{K}_m = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3,\ m_1,\ m_2,\ m_3 \text{ 为整数}. \tag{10-42}$$

$\boldsymbol{K}_m$ 称为倒格矢 (reciprocal lattice vector)，由 $\boldsymbol{K}_m$ 构成的点阵称为逆点阵 (reciprocal lattice)．

首先证明，逆点阵和其空点阵具有相同的对称点群 F．由(10-21)式和(10-42)式得到

$$\boldsymbol{K}_m\cdot\boldsymbol{R}_n = 2\pi\sum_{i=1}^{3} n_i m_i = 2\pi\times\text{整数}. \tag{10-43a}$$

由于 $\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n$ 也为格矢，所以 $\boldsymbol{K}_m\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n = 2\pi\times$ 整数．利用算符 α 的幺正性又得到以下式子

$$\boldsymbol{K}_m\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{R}_n = \alpha\boldsymbol{K}_m\cdot\boldsymbol{R}_n = 2\pi\times\text{整数}.$$

上式对任意 R_n 均成立，所以 $\alpha\boldsymbol{K}_m$ 亦为一倒格矢

$$\alpha\boldsymbol{K}_m = \boldsymbol{K}_l. \tag{10-43b}$$

由此可知，空点阵和其逆点阵必属于同一晶系．但是它们可以属于不同的类型．例如体心立方型点阵的逆点阵属于面心立方型．这一点可从(10-33)式看出．由(10-33)式可以验证

$$g_I = \frac{1}{2}a^2\cdot g_F^{-1} \tag{10-44}$$

除无关紧要的常数因子外，和条件(10-41)式一致．

14 种 Bravais 点阵中，除表 10.7 列出的四种以外，空点阵和其逆点阵均属于同一型．

表 10.7　点阵和其逆点阵的对应关系

晶　　系	空间点阵	逆　点　阵
正交晶系	体心正交型	面心正交型
	面心正交型	体心正交型
立方晶系	体心立方型	面心立方型
	面心立方型	体心立方型

§10.8　格群的不可约表示

在以 $\boldsymbol{t}_1,\ \boldsymbol{t}_2,\ \boldsymbol{t}_3$ 为基时，坐标 $\boldsymbol{r}$ 可表为

$$\boldsymbol{r} = \xi_1\boldsymbol{t}_1 + \xi_2\boldsymbol{t}_2 + \xi_3\boldsymbol{t}_3. \tag{10-45}$$

类似于(10-4)式有

$$\begin{aligned}\{\epsilon|\delta\xi_1\boldsymbol{t}_1\}\psi(\xi_1) &= \psi(\xi_1-\delta\xi_1) \cong \exp\left[-\delta\xi_1\frac{\partial}{\partial\xi_1}\right]\psi(\xi_1)\\ &= \exp\left[-(\delta\xi_1\boldsymbol{t}_1)\cdot\frac{1}{2\pi}\left(\frac{\partial}{\partial\xi_1}\boldsymbol{b}_1\right)\right]\psi(\xi_1)\end{aligned} \tag{10-46}$$

由此可知平移算符

$$\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\} = e^{-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{R}_n} = \exp\left[-\left(n_1\frac{\partial}{\partial\xi_1} + n_2\frac{\partial}{\partial\xi_2} + n_3\frac{\partial}{\partial\xi_3}\right)\right], \tag{10-47a}$$

$$\hat{\boldsymbol{k}} = -i\nabla = -i\left(\frac{\partial}{\partial\xi_1}\boldsymbol{b}_1 + \frac{\partial}{\partial\xi_2}\boldsymbol{b}_2 + \frac{\partial}{\partial\xi_3}\boldsymbol{b}_3\right)\Big/2\pi. \tag{10-47b}$$

格群是一个阿贝尔群，其完备算符集就是一个算符，即群元 $\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}=\exp(-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{R}_n)$. 它的本征函数 ψ_k 就是格群的不可约基

$$\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}\psi_k=\exp(-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{R}_n)\psi_k=\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n)\psi_k. \tag{10-48}$$

这里 $\boldsymbol{k}$ 为算符 $\hat{\boldsymbol{k}}=-i\nabla$ 的本征值，称为波矢. 它可表成:

$$\boldsymbol{k}=p_1\boldsymbol{b}_1+p_2\boldsymbol{b}_2+p_3\boldsymbol{b}_3, \tag{10-49}$$

我们就用波矢 $\boldsymbol{k}$ 标志格群的 IR.

容易找出本征方程(10-48)的一个解为:

$$\psi_k(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=e^{2\pi i(p_1\xi_1+p_2\xi_2+p_3\xi_3)}. \tag{10-50a}$$

由(10-43)式可知 $\exp(i\boldsymbol{k}_m\cdot\boldsymbol{R}_n)\equiv1$, 因此 $\psi_{k+K_m}=\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}]$ 仍然满足(10-48)式，也就是说格群 $IR(\boldsymbol{k})$ 和 $IR(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)$ 是等价的，以后我们就称波矢 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$ 为等价波矢. 格群 $IR(\boldsymbol{k})$ 的基矢的最普遍形式为

$$\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r})=\sum_{K_m}v(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}]. \tag{10-50b}$$

这里 $v(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)$ 为系数.

根据(3-348)式，容易写出格群的投影算符

$$P^{(k)}=\text{const}\sum_{R_n}\exp[i(\boldsymbol{k}-\hat{\boldsymbol{k}})\cdot\boldsymbol{R}_n] \tag{10-51}$$

§10.9 布里渊区 (Brillouim zone)

由前面讨论可知，为了得到格群的所有不等价的不可约表示，只要让 $\boldsymbol{k}$ 的三个分量 p_1, p_2, p_3 在间隔为1的范围内变化就行了.

为了直观起见，让我们引入逆点阵的元胞. 和空间点阵的元胞相类似，逆点阵的元胞定义为由基矢 $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ 构成的平行六面体. 于是只要让 $\boldsymbol{k}$ 在此元胞内变化，就能得到格群所有的不等价 IR. 这种元胞虽然构造简单，但其外型显示不出逆点阵的点群对称性. 为了显示这种对称性，我们可按以下方式构造对称元胞：在一逆点阵中，以一个格点作为原点，作此原点同所有近邻格点的连线，再作这些连线的垂直平分面(即垂直并平分这些直线的平面)，这些平面所包围的体积就是我们所要的元胞，称为 Wigner-Seitz 胞. 这种对称元胞就称为布里渊区(或第一布里渊区). 因此只要让 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区中(包括其界面)变化，就可得到格群的所有不等价的不可约表示. 布里渊区的 $\boldsymbol{k}$ 又称为约化波矢(reduced wave vector). 于是格群的不可约表示就用布里渊区的一个点，或一个约化波矢来标志.

图 10·9 以二维点阵为例，给出相应的逆点阵和布里渊区. 三维点阵的 Wigner-Seitz 胞的形状见 Bradley 和 Cracknell(1972) 图 3.2～3.15，或 Slater (1962).

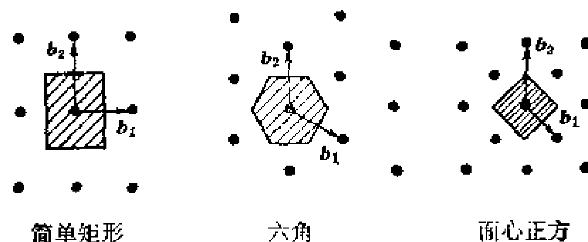


图 10·9 二维点阵的对称元胞

§10.10 周期场中的电子态

考虑电子在晶体内的运动，作为初步近似，可用独立电子模型，即假定电子在固定的平均场 $V(\boldsymbol{r})$ 中运动，$V(\boldsymbol{r})$ 具有平移对称性 $V(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n)$. 假定晶体除平移对称外没有其它对称性，因此格群就是电子哈密顿量的对称群. 于是电子的本征态必定属于格群的某一不可约表示 $\boldsymbol{k}$. 前面讲过一维 $IR(\boldsymbol{k})$ 的基矢可选为 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$. 假定 $w_k(\boldsymbol{r})$ 是格群的恒等表示的基

$$\{\epsilon|R_n\}w_k(\boldsymbol{r})=w_k(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}_n)=w_k(\boldsymbol{r}), \tag{10-52}$$

于是一维 $IR(\boldsymbol{k})$ 的基矢更普遍的形式为

$$\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r})=w_k(\boldsymbol{r})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}). \tag{10-53}$$

电子在晶体内的波函数 $\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r})$ 称为*布洛赫函数*(Bloch function).

$\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r})$ 满足薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V(\boldsymbol{r})\right]\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r})=\varepsilon(\boldsymbol{k})\varphi^{(k)}(\boldsymbol{r}). \tag{10-54a}$$

于是 $w(\boldsymbol{r})$ 满足

$$\left[\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla+i\boldsymbol{k})^2+\varepsilon(\boldsymbol{k})-V(\boldsymbol{r})\right]w_k(\boldsymbol{r})=0. \tag{10-54b}$$

由于 $w_k(\boldsymbol{r})$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的周期性函数，我们只需在一个元胞内解上面的微分方程，解时要顾及在元胞界面上的周期性边界条件. 于是由于群论，我们把解决整个晶体的问题简化到只要解决一个元胞的问题.

将周期函数 $w_k(\boldsymbol{r})$ 作傅里叶展开

$$w_k(\boldsymbol{r})=\sum_{K_m}v(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\exp[i\boldsymbol{K}_m\cdot\boldsymbol{r}]. \tag{10-55}$$

将(10-55)式代入(10-53)式，即可看到(10-50b)式为布洛赫函数的另一种表达式.

§10.11 空间群的表示空间

由于格群 T 是空间群 G 的子群，我们自然会想到取 $G\supset T$ 分类基. 由前节知道，格群 T 的 $IR(\boldsymbol{k})$ 一维表示的基矢一般可写成

$$u_k=\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}]. \tag{10-56}$$

$\boldsymbol{k}$ 被限制为布里渊区内. 相同的 $\boldsymbol{k}$，不同 $\boldsymbol{K}_m$ 的 u_k 的全体构成平移算符 $\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}$ 的一个本征空间 L_k，本征值为 $\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n)$. 布洛赫函数(10-50b)式当然属于 L_k. 我们的任务是将(10-56)式的 u_k 线性组合成空间群 G 的 IR 基(把不同 $\boldsymbol{k}$ 和不同 $\boldsymbol{K}_m$ 的 u_k 进行线性组合).

按照惯例，我们将空间群 G 的元素作用在 u_k 上，挑出线性独立的函数，它们就构成群 G 的一个表示，然后再将此表示进行约化. 群元 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 对 u_k 的作用结果为:

$$\begin{aligned}\{\alpha|\boldsymbol{a}\}u_k&=\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}]\\&=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\alpha^{-1}\boldsymbol{r}]\\&=\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}\exp[i\alpha(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}]\\&=\exp[-i\alpha(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{a}]\exp[i\alpha(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}].\end{aligned} \tag{10-57a}$$

由此可知群元 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}$ 的平移部分 $\{\epsilon|\boldsymbol{a}\}$ 只影响相因子，而转动算符 α 使得 $(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)$ 变到 $\alpha(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)$. 因此 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}u_k$ 属于本征空间 $L_{\alpha k}$. 上式表明相同的 α, 不同 $\boldsymbol{R}_n$ 的元素 $\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\}$ 所产生的基矢 $\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\}u_k$ 是线性相关的. 因此虽然空间群 G 有无穷多个元素，从 u_k 上它只能产生出 g 个线性独立的函数，g 为空间群的点群 $G_0=\{\alpha\}$ 的阶数. 这 g 个线性独立函数可选为

$$u_{\alpha k}\equiv\{\alpha|\boldsymbol{v}(\alpha)\}u_k=\exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\alpha^{-1}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}(\alpha))],\ \alpha=1,2,\cdots,g, \tag{10-57b}$$

这里利用了(10-57a)式. 显然 $u_{\alpha k}$ 属于 $L_{\alpha k}$. g 个基矢荷载空间群 G 的一个 g 维表示. 一般说这是 G 的一个可约表示.

§10.12 波矢群 $G(\boldsymbol{k})$

如何将空间群 G 的这个 g 维表示约化呢？按前面几章的做法是先求出 G 的 CSCO, 再求它的本征矢量. 但由于空间群的类算符比较复杂，我们换一种方法来求 G 的不可约基. 首先在空间群 G 和格群 T 之间插入一个群 $G(s)$, 它是 G 的子群，而 T 又是它的子群. 然后求出 $G(s)\supset T$ 不可约基，最后再求 $G\supset G(s)\supset T$ 不可约基.

G_0 群中，所有使得 $\boldsymbol{k}$ 不变或变到其等价波矢的操作 $\{\gamma\}$ 构成 G_0 的一个子群，记为 $G_0(\boldsymbol{k})$, 称为波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群或小旁群(little co-group). 根据定义有

$$\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m \tag{10-58a}$$

或写成

$$\gamma\boldsymbol{k}\doteq\boldsymbol{k}, \tag{10-58b}$$

这里记号 $\doteq$ 代表 $\gamma\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 等价.

所有操作 $\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\}$, $(\gamma\in G_0(\boldsymbol{k}))$ 构成另一个空间群，记为

$$G(\boldsymbol{k})=\{\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\}\} \tag{10-59}$$

称为*波矢群* (the wave vector group), 或*小群* (the little group), 因为它是空间群 G 的子群. $G(\boldsymbol{k})$ 又包含格群作为它的子群. 因此 $G(\boldsymbol{k})$ 可作为我们要在 G 和 T 之间插入的那个群 $G(s)$. 换一种说法是，对任一空间群子群 $G(s)$, 它的点群操作必然是某个波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群. 因此可用波矢 $\boldsymbol{k}$ 来标志这个子群，即用 $G(\boldsymbol{k})$ 代表 $G(s)$.

总之，我们下面的目标是求出 $G\supset G(\boldsymbol{k})\supset T$ 分类基.

定义 若 $\boldsymbol{k}$ 点的对称性高于其邻近的任意一点的对称性，则称 $\boldsymbol{k}$ 为一*对称点* (a point of symmetry). 对称点的 $\boldsymbol{k}$ 具有以下形式：$\boldsymbol{k}=\frac{1}{m}(n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2+n_3\boldsymbol{b}_3)$, m 和 n_i 为整数.

定义 若 $\boldsymbol{k}$ 不是一对称点，但其对称群高于恒等群 (the identity group, 仅由幺元素组成的群), 则称 $\boldsymbol{k}$ 为一*对称线*或*对称面* (a line or plane of symmetry). 例如 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{m}(n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2)+p_3\boldsymbol{b}_3$, p_3 为任意值.

若 $\boldsymbol{k}$ 没有任何对称性，则称之为一*般点*.

$G_0(\boldsymbol{k})$ 是波矢群或小群的点群，故又称为 the little co-group. 设 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的阶数为 g_l, 则空间群 G 的点群 G_0 的阶数 g 为 g_l 的整数倍，$g=qg_l$, 即

$$q=g/g_l \tag{10-60}$$

为一整数

L_k 空间的 g_l 个线性独立的函数 $u_{\gamma k}=\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}u_k$ 荷载波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的一个 g_l 维表示，将其约化就可得到 $G(\boldsymbol{k})\supset T$ 不可约基．可是波矢群仍然是一个空间群，其类算符仍然很复杂，因此还不能直接用本征函数法来求 $G(\boldsymbol{k})$ 的不可约基．不过波矢群算符 $\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+R_n\}$ 在空间 L_k 上有一个重要性质，即平移 $\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}$ 和转动＋非初始平移 $\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}$ 对易

$$[\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\},\ \{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}]=0, \tag{10-61}$$

利用它可将求波矢群 IR 问题转化为求有限群的 IR 问题．

(10-61)式证明如下．由(10-57)式得

$$\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}u_k=\exp[-i\gamma(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{R}_n]u_{\gamma k}. \tag{10-62a}$$

另一方面显然又有

$$\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}u_k=\exp[-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{R}_n]u_{\gamma k}. \tag{10-62b}$$

由于(10-58)式、(10-43b)式和(10-43a)式，以上两式右边相等，于是(10-61)式成立．

下面我们来作 g_l 个群元 $\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}$ 的乘积，设 $\gamma_1\gamma_2=\gamma_3$，由(10-26)式、(10-27)式得

$$\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}=\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)+R_l\} \tag{10-63}$$

即 g_l 个群元 $\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}$ 在乘法下不封闭，因此并不构成一个群，除非所有的非初始平移都为零（即简单空间群）．不过 (10-57a) 式告诉我们，在空间 L_k 上，算符 $\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)+R_l\}$ 和 $\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)\}$ 的作用效果只相差一个相因子：

$$\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}u_k=\eta_{12}\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)\}u_k. \tag{10-64}$$

相因子

$$\eta_{12}=\exp[-i\gamma_3(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{R}_{12}], \tag{10-65a}$$

$$\boldsymbol{R}_{12}=\gamma_1\boldsymbol{v}(\gamma_2)+\boldsymbol{v}(\gamma_1)-\boldsymbol{v}(\gamma_3). \tag{10-65b}$$

根据(10-27b)式 $\boldsymbol{R}_{12}$ 为一格矢．利用 $\gamma_3\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$ 以及 $\gamma_3\boldsymbol{K}_m$ 亦为倒格矢，η 可表为

$$\eta_{12}=\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{12}). \tag{10-65c}$$

于是在 L_k 空间有

$$\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}=\eta_{12}\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)\}. \tag{10-66}$$

g_l 个算符(或矩阵)$\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}$，$i=1,2,\cdots,g_l$，及其所有可能的幂次的积，如 $\eta_{ij}\{\gamma_i\gamma_j|\boldsymbol{v}(\gamma_i\gamma_j)\}$，$\eta_{ijk}\{\gamma_i\gamma_j\gamma_k|\boldsymbol{v}(\gamma_i\gamma_j\gamma_k)\}\cdots$（$\eta_{ij}$，$\eta_{ijk}\cdots$等为相因子），在乘法(10-66)式之下一定封闭，故构成一个群．我们把这个算符群(或矩阵群)记为

$$G_k=\{\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}\}. \tag{10-67}$$

矩阵群 G_k 可以看作为一个抽象群 $\hat{G}_k$ 在 L_k 空间上的表示．因此我们称它为*表象群*或*表示群* (representation group)．

由(10-61)式可知，波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的表示和表象群 G_k 的表示只相差一个相因子．

$$D(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}D(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}). \tag{10-68}$$

因此若 D 为 G_k 群的 IR，则将它乘上相因子 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}$ 后，就给出 $G(\boldsymbol{k})$ 群的 IR．这样就把求波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 问题化到了求表象群 G_k 的 IR 问题．

§10.13　表象群 G_k' 和 G_k 及规范变换

如果波矢 $\boldsymbol{k}$ 是一对称点，即 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{m'}(n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2+n_3\boldsymbol{b}_3)$，则(10-65c)的相因子

$$\eta_{12}=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_{12}}=e^{2\pi n i/m'}. \tag{10-69a}$$

于是 G_k 是一个有限群，阶数为 $m'g_l$，其元素为

$$e^{2\pi ni/m'}\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\},\ n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ m'-1. \tag{10-69b}$$

也就是说，G_k 是点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 m' 重覆盖群(covering group)，G_k 又称为表象群. 由于 G_k 是个有限群，因此可用通常的方法处理.

可是若 $\boldsymbol{k}$ 是一对称线或对称面时（如 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{m'}(n_1\boldsymbol{b}_1+n_2\boldsymbol{b}_2)+p_3\boldsymbol{b}_3,\ p_3$ 为任意值)，相因子 η 就不能写成(10-69a)式那样简单的形式，G_k 不再是 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 m 重覆盖群，而有可能是个无限群(例如当 $\boldsymbol{k}$ 的某一分量 p_i 为无理数时)，为了避免上述困难，我们对群 G_k 作一个规范变换，即令

$$\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}. \tag{10-69c}$$

$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}$ 为一相因子. 由(10-65)式和(10-66)式可知在 L_k 空间有：

$$\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}'\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}'=\eta'_{12}\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)\}', \tag{10-70a}$$

$$\eta'_{12}=\exp[-i\boldsymbol{k}\cdot(\gamma_1\boldsymbol{v}(\gamma_2)-\boldsymbol{v}(\gamma_2))]. \tag{10-70b}$$

由(10-58a)式可知

$$\gamma_1^{-1}\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_{\gamma_1}. \tag{10-71}$$

这里 $\boldsymbol{K}_{\gamma_1}$ 为一倒格矢，于是

$$\eta'_{12}=\exp(-i\boldsymbol{K}_{\gamma_1}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)). \tag{10-70c}$$

根据 (10-25d) 式，非初始平移 $\boldsymbol{v}(\gamma_2)$ 为格矢 $\boldsymbol{R}_n$ 的 (n/m) 倍，n, m 为整数，$m>l$. 因而(10-70a)式中的相因子 η'_{12} 可表为

$$\eta'_{12}=\exp(-i\boldsymbol{K}_{\gamma_1}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2))=e^{2\pi ni/m}. \tag{10-70d}$$

因此若把 g_l 个算符

$$R_i\equiv\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_i)}\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\} \tag{10-72a}$$

扩大到 mg_l 个算符

$$R_i^{(n)}=e^{2\pi ni/m}R_i, \tag{10-72b}$$

$$n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ m-1;\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ g_l,$$

则这 mg_l 个算符在 L_k 空间构成一个阶数为 mg_l 的群，记为

$$G'_k=\{\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'\}. \tag{10-73}$$

G'_k 为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 m 重覆盖群，也称为表象群.

由于群 G'_k 和 G_k 只差一个规范变换 (10-69c) 式，G'_k 的 IR 基也就是 G_k 的 IR 基. 若 $D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}')$[1] 为 G'_k 的 IR，则 G_k 群的 IR 为

$$D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'). \tag{10-74}$$

由(10-61)，(10-68)和(10-69c)式可知 $G(\boldsymbol{k})$，G_k 和 G'_k 有相同的 IR 基，而波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 为

$$D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{c}\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}}D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'). \tag{10-75}$$

这样就将求无限群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 问题转化到求有限群 G_k 或 G'_k 的 IR 问题. 如果 $\boldsymbol{k}$ 为对称点，我们既可用 G_k 群也可用 G'_k 群来处理问题. 由于 G_k 群的乘法关系(10-64)式比 G'_k 群的乘法关系(10-70)式来得复杂一些，我们下面只处理 G'_k 群. 但以下的讨论原则上也

1) 一般书上将 $D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}')$ 称为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的投射表示(projective representation)或 ray representation，并记为 $D^{(\nu)}(\gamma)$. 见 Birman 或 Bradly 和 Cracknell.

适用于 G_k 群.

§10.14 表象群 G'_k 的不可约表示

g_t 个函数

$$u_i = R_i \exp[i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}], \tag{10-76a}$$

$$R_i = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_i)}\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\},\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ g_t. \tag{10-76b}$$

构成表象群 G'_k 的一个表示空间 $L(\boldsymbol{k})$, 它是 L_k 的一个子空间. 用第三章标准方法将它约化,就可求得 G'_k 群的 IR.

由于 G'_k 群群元 R_i 和基矢 u_i 是一一对应的,我们也可把 R_i 看成空间 $L(\boldsymbol{k})$ 的基矢. 在实际求群表示时,从群元 R_i 出发比从 u_i 出发更方便.

当 $m=1$ 时, G'_k 群同构于点群 $G_0(\boldsymbol{k})$, 而 $L(\boldsymbol{k})$ 就是 G'_k 的正则表示空间. 当 $m>1$ 时, $L(\boldsymbol{k})$ 不是 G'_k 的正则表示空间. 下面讨论这种情形下表象群 G'_k 的一些特殊性.

G'_k 群的乘法关系: 由(10-70)式很容易求出 G'_k 群的乘法关系,这种乘法关系比空间群的乘法关系简单得多; 它和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的乘法关系十分类似. 例如若 G'_k 为 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的二重覆盖群, 由 (10-72b)式知 $R'_i \equiv R_i^{(1)} = -R_i$. 由 $G_0(\boldsymbol{k})$ 群的乘法关系

$$\gamma_i\gamma_j = \gamma_k \tag{10-77a}$$

可推知 G'_k 群的乘法关系为 $R_iR_j = R_k$ 或 $R_iR_j = R'_k$. 由前者可推知:

$$R_iR_j = R'_iR'_j = R_k,\ R_iR'_j = R'_iR_j = R'_k; \tag{10-77b}$$

由后者可推知

$$R_iR_j = R'_iR'_j = R'_k,\ R_iR'_j = R'_iR_j = R_k. \tag{10-77c}$$

因此只要给出 g_t 个群元 $R_1\cdots R_{g_t}$ 的乘法关系就足以知道 G'_k 群所有 $2g_t$ 个元素的乘法关系了.

G'_k 群的类: 若点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 中有

$$\gamma_j\gamma_i\gamma_j^{-1} = \gamma_k, \tag{10-78a}$$

则对 G'_k 群有

$$R_jR_iR_j^{-1} = e^{2\pi il/m}R_k. \tag{10-78b}$$

上式告诉我们, 若在点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 中, γ_i 和 γ_k 属于同一类, 则在 G'_k 群中, R_i 可能和 $R_k^{(l)}$ 属同一类. 反之如果 γ_i 和 γ_k 不属于同一类, 则 R_i 和所有 $R_k^{(l)}(l=0,\ 1,\ \cdots,\ m-1)$ 都不属于同一类. 因此根据点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的类,很容易求得 G'_k 群的类.

G'_k 群的类算符:

首先要指出, G'_k 群的线性独立的类算符个数 N' 小于 G'_k 群的类的个数 N. 例如对 $m=2$ 时, 可能 R_i 和 $R'_i=-R_i$ 属于同一类, 因此类算符 $C_i=R_i+R'_i=0$, 也有可能第 i 类和第 j 类算符只差一个符号, $C_i=-C_j$, 等等. 原因何在呢? 原因在于 G'_k 是个表象群, 换言之, G'_k 可看作一个抽象群 $\hat{G}_{k'}$ 在 $L(\boldsymbol{k})$ 空间的表示. 抽象群 $\hat{G}_{k'}$ 和表象群 G_k 有相同的乘法关系, 只不过对抽象群应把 R'_i 看成独立的元素, $C_i=R_i+R'_i$ 为一个独立的算符. 只有在表示空间 $L(\boldsymbol{k})$ 上, 才有 $R'_i=-R_i$, $C_i=0$(即 C_i 为零矩阵).

G'_k 群的 CSCO-I.

现在我们回到表象群 G'_k. G'_k 只有 $N'<N$ 个线性独立的类算符 $C_1,\ C_2,\ \cdots,\ C_{N'}$. 仿照

(3-34)式后面的一段证明，可证明在空间 $L(\boldsymbol{k})$ 上算符集 $(C_1, C_2, \cdots, C_{N'})$ 有 N' 套不同的本征值，因此表象群 G'_k 的 CSCO-I 也只有 N' 套不同的本征值 ν. 又根据第三章，每一个 ν 标志一个不等价的 IR，因此表示空间 $L(\boldsymbol{k})$ 可约化成 N' 个不等价的 IR.

类似地可证明，虽然 $L(\boldsymbol{k})$ 不是 G'_k 群的正则表示空间，但是当它约化时，某一 $IR(\nu)$ 出现的次数仍然等于该 IR 的维数，即

$$D^{(k)}=\sum_{\nu=1}^{N'}\oplus h_\nu D^{(\nu,k)}. \tag{10-79a}$$

这里 $D^{(k)}$ 为 G'_k 群在空间 $L(\boldsymbol{k})$ 中的表示，$D^{(\nu,k)}$ 为 G'_k 群的 IR. 因此有

$$g_l=\sum_{\nu=1}^{N'}h_\nu^2. \tag{10-79b}$$

为了将表示空间 $L(\boldsymbol{k})$ 分解，首先要找 G'_k 群的 CSCO-I. 我们当然可以在抽象群 $\hat{G}'_k$ 的类空间去找. 不过更方便的办法是直接在 $L(\boldsymbol{k})$ 空间上找. 即找一个算符集 $C=(C_i, C_j, \cdots)$，它们有 N' 套不同的本征值，N' 为 G'_k 群中线性独立的类算符个数.

如果利用现成的 G'_k 群的特征标表（如 Kovalev, 或 Bradley 和 Cracknell)，则可根据§3.12 的方法，很容易地找到 G'_k 群的 CSCO-I(见§10.23 例1).

当 $h_\nu>1$ 时，我们要引入合适的群链 $G'_k\supset G'(s)$，及其对应的内禀群链 $\bar{G}'_k\supset\bar{G}'(s)$，使得 $(C, C(s), \bar{C}(s))$ 为 g_l 维空间 $L(\boldsymbol{k})$ 中的 CSCO，它们的共同本征函数 $u_{k,a}^{(\nu)b}$ 就是 $G'_k\supset G'(s)$ 分类基 $(\nu, \boldsymbol{k})a$ 和 $\bar{G}'_k\supset\bar{G}'(s)$ 分类基 $(\nu, \boldsymbol{k})b$，即

$$\begin{pmatrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{pmatrix} u_{k,a}^{(\nu)b}=\begin{pmatrix} \nu \\ a \\ b \end{pmatrix} u_{k,a}^{(\nu)b}. \tag{10-79c}$$

$u_{k,a}^{(\nu)b}$ 为 u_i 或 R_i 的线性组合

$$u_{k,a}^{(\nu)b}=\sum_{i=1}^{g_l}\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}u_i, \tag{10-79d}$$

或

$$u_{k,a}^{(\nu)b}=\sum_{i=1}^{g_l}\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}R_i. \tag{10-79e}$$

展开系数 $\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}$ 满足矩阵方程

$$\sum_{i=1}^{g_l}\left[\left\langle R_j\left|\begin{matrix} C \\ C(s) \\ \bar{C}(s) \end{matrix}\right|R_i\right\rangle-\begin{pmatrix} \nu \\ a \\ b \end{pmatrix}\delta_{ij}\right]\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}=0,\ j=1, 2, \cdots, g_l. \tag{10-79f}$$

解此本征方程，并利用归一条件，便可找到 $\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}$.

下面我们来找展开系数 $\mathscr{A}_{ab,i}^{(\nu,k)}$ 和表象群不可约矩阵元 $D_{ab}^{(\nu,k)}(R_i)$ 之间的关系.

设 $\mathring{P}_a^{(\nu,k)b}$ 为抽象群 $\hat{G}'_k$ 的广义投影算符

$$\mathring{P}_a^{(\nu,k)b}=\sqrt{\frac{h_\nu}{mg_l}}\sum_{n=0}^{m-1}\sum_{i=1}^{g_l}D_{ab}^{(\nu,k)}(R_i^{(n)})^*R_i^{(n)}. \tag{10-80a}$$

利用

$$R_i^{(n)}=e^{2\pi ni/m}R_i,\ R_i=\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\}',$$
$$D_{a,b}^{(\nu,k)}(R_i^{(n)})=e^{2\pi ni/m}D^{(\nu,k)}(R_i).$$

投影算符(10-80a)式可简化为(经重新归一化后)

$$\mathring{P}_a^{(\nu,k)b}=\sqrt{\frac{h_\nu}{g_l}}\sum_{i=1}^{g_l}D_{ab}^{(\nu,k)}(R_i)^*R_i. \tag{10-80b}$$

波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基可表为

$$u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)b}=\overset{\circ}{P}{}_a^{(\nu,\boldsymbol{k})b}u_{\boldsymbol{k}}. \tag{10-81a}$$

$u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)b}$ 为 $u_i=R_iu_{\boldsymbol{k}}$ 的线性组合

$$u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)b}=\sum_{i=1}^{g_l}\mathscr{A}_{ab;i}^{(\nu,\boldsymbol{k})}u_i. \tag{10-81b}$$

比较(10-81a)式和(10-81b)式得到展开系数 $\mathscr{A}_{ab;i}^{(\nu,\boldsymbol{k})}$ 和 IR 矩阵元的关系

$$D_{ab}^{(\nu,\boldsymbol{k})}(R_i)=\sqrt{\frac{g_l}{h_\nu}}(\mathscr{A}_{ab;i}^{(\nu,\boldsymbol{k})})^*, \tag{10-82}$$

这里 $R_i=\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'$. (10-82)式和(3-200)式形式上完全一致. 注意上式只有对本征矢量 $u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)b}$ 的位相作适当的选取后才成立. 否则上式右端要乘上一个和指标 a 有关的相因子(见§3.9). 关于本征矢量位相的选取见§10·20例子. 利用(10-82)式可由展开系数 $\mathscr{A}_{ab;i}^{(\nu,\boldsymbol{k})}$ 方便地给出表象群 $G_{\boldsymbol{k}}'$ 的不可约矩阵.

230个空间群中, g_l 至多等于48. 由此可知, 只要求解本征方程(10-79f)式(它的阶数至多为48), 便可求得任一空间群任一 $\boldsymbol{k}$ 点的表象群 $G_{\boldsymbol{k}}'$ 的所有不可约矩阵元.

投影算符方法: 空间群的传统表示理论中(如 Slater, 1962)常用投影算符方法来求 IR 基. 文献中(如 Bradley 和 Cracknell 1972) 常列出一个空间群在各个特殊 $\boldsymbol{k}$ 点的波矢群 $G(\boldsymbol{k})$的 IR 特征标 $\chi^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\gamma_i|\boldsymbol{v}_i)$, 和其生成元的 IR 矩阵 $D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\})$, 由后者通过矩阵相乘可以产生出波矢群的不可约表示. Kovalev 列出的则是表象群 $G_{\boldsymbol{k}}'$ 的 IR 矩阵 $D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\}')$. 由(10-76b)式, 投影算符(10-80b)又可表成

$$\overset{\circ}{P}{}_a^{(\nu,\boldsymbol{k})b}=\sqrt{\frac{h_\nu}{g_l}}\sum_{i=1}^{g_l}D_{ab}^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\})^*\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\}. \tag{10-80c}$$

因此我们可用(10-81a)式或下式求波矢群的 IR 基

$$u^{(\nu,\boldsymbol{k})}=\text{const}\,P^{(\nu,\boldsymbol{k})}u_{\boldsymbol{k}}, \tag{10-83a}$$

$$P^{(\nu,\boldsymbol{k})}=\frac{h_\nu}{g_l}\sum_{i=1}^{g_l}\chi^{(\nu,\boldsymbol{k})}(R_i)^*R_i=\frac{h_\nu}{g_l}\sum_{i=1}^{g_l}\chi^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\gamma_i|\boldsymbol{v}_i)^*\{\gamma_i|\boldsymbol{v}_i\}. \tag{10-83b}$$

§10.15 空间群的不可约表示和不可约基

首先将空间群 G 按波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 作左陪集分解,

$$G=G(\boldsymbol{k})+\{\beta_2|\boldsymbol{v}(\beta_2)\}G(\boldsymbol{k})+\cdots+\{\beta_q|\boldsymbol{v}(\beta_q)\}G(\boldsymbol{k}). \tag{10-84}$$

$\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$ 称为空间群相对于 $G(\boldsymbol{k})$ 的(左)陪集代表 (coset representative). 假定 $u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)}$ 为波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基, 定义

$$u_{\boldsymbol{k}_\sigma,a}^{(\nu)}=\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}u_{\boldsymbol{k},a}^{(\nu)},\ \sigma=1,2,\cdots,q,\ a=1,2,\cdots,h_\nu, \tag{10-85}$$

这里约定 $\{\beta_1|\boldsymbol{v}(\beta_1)\}=\{\epsilon|0\}$. q 个波矢

$$\boldsymbol{k}_\sigma=\beta_\sigma\boldsymbol{k},\ \sigma=1,2,\cdots,q, \tag{10-86a}$$

构成一个所谓 $\boldsymbol{k}$ 星(或波矢星)

$$^*\boldsymbol{k}=(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\cdots,\boldsymbol{k}_q), \tag{10-86b}$$

$\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}$ 称为正则波矢(canonical wave vector)(显然也可选 $\boldsymbol{k}$ 星中的任一波矢为正则波矢). $u_{\boldsymbol{k}_\sigma,a}^{(\nu)}$ 属于 $\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}$ 的本征空间 $L_{\boldsymbol{k}_\sigma}$. 可以证明, (见 Chen, Gao and Ma (1983), 或 Johnston

(1961))(10-85)式的 $u_{k_\sigma,a}^{(\nu)}$ 荷载空间群的一个 qh_ν 维 $IR\ \mathscr{D}^{(\nu,*k)}$,或简记为 $\mathscr{D}^{(\nu,k)}$.

$$\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\alpha|\boldsymbol{a}\})=\langle u_{k_\tau b}^{(\nu)}|\{\alpha|\boldsymbol{a}\}|u_{k_\sigma a}^{(\nu)}\rangle. \tag{10-87}$$

为了计算上式,我们把 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$ 表成 $\{\beta_\tau|\boldsymbol{v}(\beta_\tau)\}$ 和空间群某一元素 $R_{\tau\sigma}$ 的积:

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}=\{\beta_\tau|\boldsymbol{v}(\beta_\tau)\}R_{\tau\sigma}, \tag{10-88a}$$

$$R_{\tau\sigma}=\{\beta_\tau|\boldsymbol{v}(\beta_\tau)\}^{-1}\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}. \tag{10-88b}$$

将(10-88)式代入(10-87)式并利用(10-85)式,

$$\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\alpha|\boldsymbol{a}\})=\langle u_{k,b}^{(\nu)}|R_{\tau\sigma}|u_{k,a}^{(\nu)}\rangle. \tag{10-89a}$$

由陪集分解(10-84)式可知, $R_{\tau\sigma}$ 要末属于波矢群 $G(\boldsymbol{k})$, 要末属于 $\{\beta|\boldsymbol{v}(\beta)+\boldsymbol{R}_n\}$. 当 $R_{\tau\sigma}$ 属于 $G(\boldsymbol{k})$ 时, (10-89a)式右边就是波矢群的不可约矩阵元 $D_{ba}^{(\nu,k)}(R_{\tau\sigma})$. 当 $R_{\tau\sigma}$ 不属于 $G(\boldsymbol{k})$ 时, $R_{\tau\sigma}$ 作用在 $u_{k,a}^{(\nu)}$ 上,必将改变其波矢 $\boldsymbol{k}$. 由于 $\boldsymbol{k}$ 标志平移群的 IR, 而属于不同 IR 的基是正交的,因此(10-89a)式为零. 我们可将(10-89a)式改写成

$$\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\alpha|\boldsymbol{a}\})=D_{ba}^{(\nu,k)}(R_{\tau\sigma}), \tag{10-89b}$$

$R_{\tau\sigma}$ 由(10-88b)式给出, 并约定当 $R_{\tau\sigma}$ 不属于 $G(\boldsymbol{k})$ 时, $D^{(\nu,k)}(R_{\tau\sigma})\equiv 0$. 写成子矩阵的形式,空间群的表示可写成:

$$\mathscr{D}^{(\nu,k)}(\{\alpha|\boldsymbol{a}\})=\begin{pmatrix}\boldsymbol{D}(11) & \boldsymbol{D}(12) & \cdots & \boldsymbol{D}(1q)\\ \boldsymbol{D}(21) & \boldsymbol{D}(22) & \cdots & \boldsymbol{D}(2q)\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ \boldsymbol{D}(q1) & \boldsymbol{D}(q2) & \cdots & \boldsymbol{D}(qq)\end{pmatrix}, \tag{10-90a}$$

$\boldsymbol{D}(\tau\sigma)$ 为 $h_\nu\times h_\nu$ 矩阵

$$\boldsymbol{D}(\tau\sigma)\equiv D^{(\nu,k)}(R_{\tau\sigma}). \tag{10-90b}$$

空间群表示 $\mathscr{D}^{(\nu,k)}$ 的维数为

$$qh_\nu=gh_\nu/g_l. \tag{10-90c}$$

当 $R_{\tau\sigma}\in G(\boldsymbol{k})$ 时, (10-88a)式其实就是空间群元 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$ 相对于 $G(\boldsymbol{k})$ 的左陪,所以只有一个 τ 能够使(10-88b)式的 $R_{\tau\sigma}$ 属于 $G(\boldsymbol{k})$. 由此可见, (10-90a)式中, 每一行或每一列中,都只有一个方块不是非零矩阵. 对于非零矩阵,可用以下方法计算.

由(10-88b)式得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{\tau\sigma}&=\{\beta_\tau^{-1}|-\beta_\tau^{-1}\boldsymbol{v}_\tau\}\{\alpha|a\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_\sigma\}\\&=\{\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma|\beta_\tau^{-1}(\alpha\boldsymbol{v}_\sigma-\boldsymbol{v}_\tau+\boldsymbol{a})\}.\end{aligned} \tag{10-89c}$$

由(10-89b)式、(10-89c)式和(10-75)式得到

$$\begin{aligned}\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\alpha|\boldsymbol{a}\})&=D_{ba}^{(\nu,k)}(R_{\tau\sigma})\\&=e^{-ik_\tau\cdot(\alpha v_\sigma-v_\tau+a)}D_{ba}^{(\nu,k)}(\{\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_{\tau\alpha\sigma}\}').\end{aligned} \tag{10-89d}$$

这里 $\boldsymbol{v}_{\tau\alpha\sigma}$ 为和 $\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma$ 相联系的非初始平移. 于是子矩阵

$$\boldsymbol{D}(\tau\sigma)=e^{-ik_\tau\cdot(\alpha v_\sigma-v_\tau+a)}\boldsymbol{D}^{(\nu,k)}(\{\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_{\tau\alpha\sigma}\}'). \tag{10-89e}$$

(10-90a)式和(10-89e)式告诉我们, 知道了表象群的 IR 后,求空间群的表示是十分简单的. 只要利用点群乘法关系, 求出积 $\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma$. 若 $\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma\in\{\gamma\}$, 则由(10-89e)式即可得到子矩阵 $\boldsymbol{D}(\tau\sigma)$. 若 $\beta_\tau^{-1}\alpha\beta_\sigma\notin\{\gamma\}$, 则 $\boldsymbol{D}(\tau\sigma)=0$. 例子见(10-145).

令(10-89d)式中 $\alpha=\epsilon$, 立即得到纯平移算符的矩阵表示

$$\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\})=\delta_{\tau\sigma}\delta_{ba}e^{-ik_\tau\cdot R_n}, \tag{10-89f}$$

即

$$\mathscr{D}^{(\nu,k)}(\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\})=\begin{pmatrix}(e^{-ik\cdot R_n})I & & & 0\\ & (e^{-ik_2\cdot R_n})I & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & (e^{-ik_q\cdot R_n})I\end{pmatrix}. \tag{10-90d}$$

这里 I 为 $h_\nu\times h_\nu$ 单位矩阵.

现在我们来看一下空间群 G 的 IR 基矢 $u^{(\nu)}_{k_\sigma,a}$ 的意义. 首先类似于 (10-58) 式可定义波矢 $\boldsymbol{k}_\sigma=\beta_\sigma\boldsymbol{k}$ 的波矢群 $G(\boldsymbol{k}_\sigma)$: 在它的转动操作下波矢 $\boldsymbol{k}_\sigma$ 不变或变到它的等价波矢. 显然 $G(\boldsymbol{k}_\sigma)$ 为 $G(\boldsymbol{k})$ 的相似群(见(3-146)式),

$$G(\boldsymbol{k}_\sigma)=\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}G(\boldsymbol{k})\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}^{-1}. \tag{10-91}$$

若 $\{\alpha|\boldsymbol{a}\}\in G(\boldsymbol{k}_\sigma)$, 即

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}=\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}^{-1}, \tag{10-92}$$

则立即可证明

$$\{\alpha|\boldsymbol{a}\}u^{(\nu)}_{k_\sigma a}=\sum_b D^{(\nu,k)}_{ba}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\})u^{(\nu)}_{k_\sigma,b}. \tag{10-93}$$

这就告诉我们,$u^{(\nu)}_{k_\sigma a}$ 是波矢群 $G(\boldsymbol{k}_\sigma)$ 的 IR 基. 因此空间群 G 的 $IR(\boldsymbol{\nu},\boldsymbol{k})$ 的某一分量 $u^{(\nu)}_{k_\sigma a}$ 是 $G\supset G(\boldsymbol{k}_\sigma)\supset T$ 分类基,由此看到空间群同一表示不同分量 σ 的基属于不同的分类. 这一点同我们以往讨论过的群表示是有很大差别的,以往我们对同一IR的各个分量总是采用同一种 $G\supset G(s)$ 分类基的.

我们用波矢群的IR标志 ν 和 $\boldsymbol{k}$ 来标志空间群 G 的 IR,显然也可用 ν 和 $\boldsymbol{k}$ 星中的任一 $\boldsymbol{k}_\sigma$ 来标志空间群 G 的 IR.

总之, 求空间群不可约表示的方法可归纳为: 首先在布里渊区内或其界面上选择一个波矢 $\boldsymbol{k}$. 根据 $\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$ 求出波矢群 $G(\boldsymbol{k})=\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\}$, 求出 $G(\boldsymbol{k})$的不可约基 $u^{(\nu)}_{k,a}$, 和不可约表示 $D^{(\nu,k)}$. 再由(10-85) 式和 (10-89) 式就可求得空间群的不可约基和不可约表示基. 为了得到空间群的所有不等价的 IR, 只要让波矢 $\boldsymbol{k}$ 遍及这样一组点就行了,这组点中的任意两个点 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}'$ 都不满足 $\alpha\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{K}_m$, $\boldsymbol{K}_m$ 为任一倒格矢, α 为 G_0 群的任一元素.

§10.16 求波矢群 IR 基的步骤

由前面讨论看到, 求空间群的不可约表示归结为找波矢群的不可约表示. 对后一问题可采取以下步骤.

(a) 确定波矢群的点群 $G_0(\boldsymbol{k})$

根据空间群所属的点阵类型,写下初始平移 $\boldsymbol{t}_{1,2,3}$(见图 10·5),求出逆点阵的基矢 $\boldsymbol{b}_{1,2,3}$. 画出逆点阵的对称元胞即布里渊区. 对某些点阵, 画出对称元胞是相当困难的. 幸好文献上可以查到(例如可参看 Bradley 和 Cracknell (1972), p. 96～112).

布里渊区中的某些点落在转动轴或反射面上,这些点在转动或反射下不变,某些在布里渊区界面上的 $\boldsymbol{k}$ 点,虽然在转动或反射下可能要变,但变化后的波矢 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$, 即和原来的波矢 $\boldsymbol{k}$ 等价. 布里渊区中这些具有一定对称性的点,就是前面定义的对称点 (poin of symmetry), 对称线或面 (line or plane of symmetry), 在固体物理中都用标准的记号, 如 Γ, Λ, Σ, X 等标出. 它们统称为特殊的 $\boldsymbol{k}$ 星. Bradley 和 Cracknell (p. 96～118) 给出了所

有可能的布里渊区中的各种对称点及其对称群 $G_0(\boldsymbol{k})$.

例如简单立方格子的初始平移为 $\boldsymbol{t}_1=a\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{t}_2=a\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{t}_3=a\boldsymbol{k}$. 相应的 $\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{k}$. 对称元胞表示于图 10·16-1. 元胞是用垂直平分 $\pm\boldsymbol{b}_{1,2,3}$ 的六个面构成的立方体. 图中标出了具有一定对称性点, 其中 X, M, R 为对称点, Δ, Σ, Λ, S, Z 和 T 为对称线或面. 让我们逐点来确定它们的波矢群的点群 $G_0(\boldsymbol{k})$.

(1) Γ 点: 原点 $\Gamma(\boldsymbol{k}=0)$ 是一个格点. 由于原点在 O_h 群所有操作下不变, Γ 点具有 O_h 对称性. 于是 $G_0(\boldsymbol{k})=G_0=O_h$. $G_0(\boldsymbol{k})$ 群的阶数 $g_l=g=48$, $q=g/g_l=1$. 而波矢群就是空间群本身. $G(\boldsymbol{k})=G$.

(2) Z 点: 这是立方体侧面和 $k_z=0$ 平面交线上的一般点. 它在群 $\mathscr{C}_{2v}=(\epsilon, \sigma^x, \sigma^y, C_2^x)$ 的操作下不变或变到其等价点, 所以 $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$, 阶数 $g_l=4$, $q=g/g_l=12$. 因此 $\boldsymbol{k}$ 星包含 12 个点, 如图 10·16-2 所示. 图中四条点线代表 $\boldsymbol{k}$ 星在 xy 平面上的四个点, 再加上 xz 和 yz 平面上各四个点, 共有 12 个点. 图中虚线代表的波矢 $\boldsymbol{k}$ 等价于实线所代表的波矢.

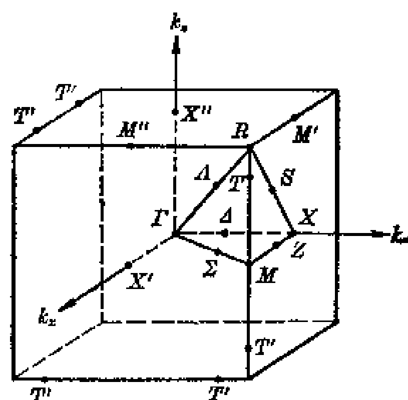


图 10·16-1 简单立方的布里渊区

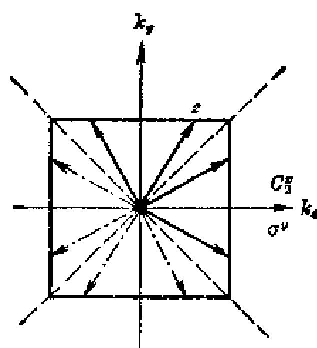


图 10·16-2 z 点, $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$, k_x 轴为 2 度轴. $\mathscr{C}_{2v}=(e, \sigma^y, \sigma^z, C_2^x)$

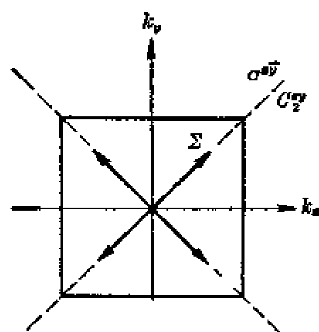


图 10·16-3 Σ 点, $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$, $\mathscr{C}_{2v}=(e, \sigma^{x\bar{y}}, \sigma^z, C_2^{xy})$

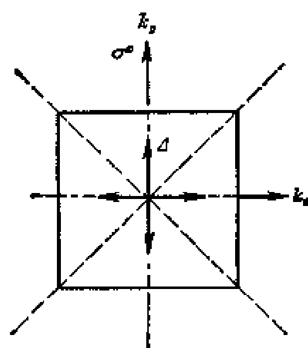


图 10·16-4 Δ 点, $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{4v}$ 4 度轴为 k_y, $g_l=8$, $q=6$

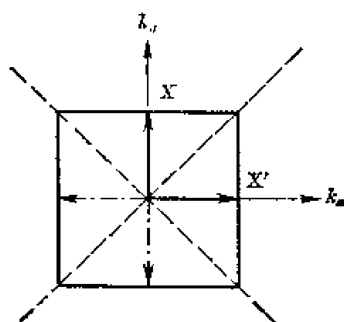


图 10·16-5 X 点, $G_0(\boldsymbol{k})=D_{4h}$, k_y 为 4 度轴, $g_l=16$, $q=3$

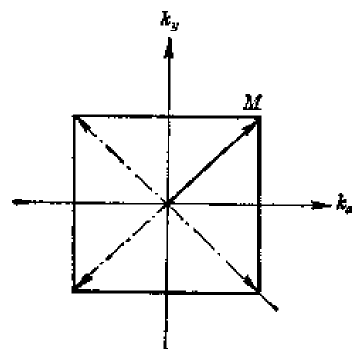


图 10·16-6 M 点, $G_0(\boldsymbol{k})=D_{4h}$, k_z 为 4 度轴, $g_l=16$, $q=3$

(3) Σ 点: 波矢在 $\boldsymbol{k}_x$ 和 $\boldsymbol{k}_y$ 轴之间的夹角的平分线上 (见图 10·16-3). $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$, $\mathscr{C}_{2v}=(\epsilon, C_2^{xy}, \sigma^{x\bar{y}}, \sigma^z)$, $g_l=4$, $q=12$. $\boldsymbol{k}$ 星包含 12 个点.

(4) Δ 点: 波矢沿 $\boldsymbol{k}_y$ 轴, $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{4v}$, $\mathscr{C}_{4v}$ 群的 4 度轴为 $\boldsymbol{k}_y$. $g_l=8$, $q=6$. $\boldsymbol{k}$ 星包含 6 个点. 图 10·16-4 给出 xy 平面上的四个点, 另外两个点分别在 $\boldsymbol{k}_z$ 和 $-\boldsymbol{k}_z$ 方向上.

(5) X 点: X 点为 $\boldsymbol{k}_y$ 轴和侧面的交点. $G_0(\boldsymbol{k})=D_{4h}$, 其 4 度轴为 $\boldsymbol{k}_y$. $g_l=16$, $q=3$.

星包含 X, X' 和 X'' 三个点(见图 10·16–1 和图 10·16–5).

(6) M 点: $G_0(\boldsymbol{k})=D_{4h}$, $\boldsymbol{k}_z$ 为其 4 度轴 (见图 10·16–6). $g_l=16$, $q=3$, k 星包含 M, M' 和 M'' 三个点(见图 10·16–1).

(7) T 点: $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{4v}$, 4 度轴为 $\boldsymbol{k}_z$. $g_l=8$, $q=6$, $\boldsymbol{k}$ 星包含 6 个点 (见图 10·16–1).

(8) Λ 点: $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{3v}$, 从原点 Γ 到 Λ 点的连线为其 3 度轴. $g_l=6$, $q=8$.

(9) R 点: $G_0(\boldsymbol{k})=G_0=O_h$, k 星只包含一个点.

下面根据不同的 $\boldsymbol{k}$ 值来讨论波矢群 IR 的求法.

(b) 一般的 $\boldsymbol{k}$ 星(general star)

如果波矢 $\boldsymbol{k}$ 没有任何对称性, 即如果对所有的 $\alpha\in G_0$, $\alpha\boldsymbol{k}$ 都和 $\boldsymbol{k}$ 不等价, 则称它为一般的 $\boldsymbol{k}$ 星, 这时 $G_0(\boldsymbol{k})=e$ (幺元素), 而波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 就等于格群 T; u_k 就是波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基, 而 $u_{\alpha k}$((10–57b) 式)就是空间群 G 的 IR 基, G 的 IR 只需用波矢 $\boldsymbol{k}$ 或 $^*\boldsymbol{k}$ 来标志, 记为 $\mathscr{D}^{(k)}$, 其维数为 g.

(c) 布里渊区内部的 $\boldsymbol{k}$ 点

当 $\boldsymbol{k}$ 不在布里渊区界面上时, 满足 $\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$ 的唯一可能是 $\boldsymbol{K}_m=0$, 即

$$\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}. \tag{10–94}$$

和(10–71)式比较可知, 现在 $K_\gamma\equiv0$, (10–70c)的相因子 $\eta'\equiv1$, (10–70a)式变为

$$\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}'\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}'=\{\gamma_3|\boldsymbol{v}(\gamma_3)\}'. \tag{10–95}$$

因此现在表象群 $G'_k=\{\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'\}$ 和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 同构, 因此它们有相同的不可约表示. 若 $D^{(\nu)}$ 为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 IR, 则表象群 G'_k 的 IR 为

$$D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}')=D^{(\nu)}(\gamma). \tag{10–96}$$

而波矢群的 IR(10–75) 式变为

$$D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{c}\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}}\,D^{(\nu)}(\gamma). \tag{10–97}$$

由此得到结论: 对布里渊区内部的 $\boldsymbol{k}$ 点, 表象群 G'_k 和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 同构. $\{u_i\}$ 或 $\{R_i\}$ [见(10–76)式]构成 G'_k 群的正则表示基底. 只要将点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的正则表示约化, 就可得到表象群 G'_k 的 IR 矩阵和 IR 基(当然也可利用点群表示的现成结果而免去计算). 至于波矢群的 IR, 则可由(10–97)式立刻得到. 注意, 虽然 G'_k 和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 同构, 但它们的 IR 基并不重合(见 § 10·20 例 1), 除非 $G(\boldsymbol{k})$ 为简单空间群.

(d) 布里渊区界面上的 $\boldsymbol{k}$ 点

(1) 简单空间群

对简单空间群, 非初始平移 $\boldsymbol{v}(\gamma)\equiv0$, (10–67)式的群 $G_k=\{\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}\}$ 就是点群 $G_0(\boldsymbol{k})=\{\gamma\}$. 而

$$G(\boldsymbol{k})=G_0(\boldsymbol{k})\times T, \tag{10–98}$$

即波矢群为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 和格群 T 的直接乘积. 于是求波矢群的 IR 基和 IR 问题就归结为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的正则表示约化问题. 正则表示的基矢为 γ_i 或

$$u_i=\gamma_i u_k,\ i=1,\ 2,\ \cdots,\ g_l. \tag{10–99}$$

点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基也就是波矢群的 IR 基, 而波矢群的 IR 仍由(10–97)式给出.

(2) 非简单空间群

对某些 $\boldsymbol{k}$ 点, 如果其波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 为简单空间群 $G(\boldsymbol{k})=\{\gamma|\boldsymbol{R}_n\}$, 则仍归结为上述情形(1).

如果波矢群为非简单空间群，则必须引入表象群 G'_k，并按 § 10·14 的方法处理.

总之，只有对波矢群为非简单空间群，对布里渊区界面上的点，才要用覆盖群 G'_k 求空间群的 IR 基和 IR，其余情形都可归结为求点群或和点群同构的群的 IR 基和 IR 问题.

§ 10.17 构造波矢群 IR 的特征标方法

前面介绍的方法是通过在空间 $L(\boldsymbol{k})$ 中求解本征方程而同时求得波矢群的 IR 基、IR 矩阵元和特征标的. 而 Bradley 和 Cracknell 方法是先求出抽象群 $\hat{G}_k$ 或 $\hat{G}'_k$ 的全部特征标，然后从中挑选出能在空间 $L(\boldsymbol{k})$ 中出现的那些表示的特征标，再令表象群 G_k 的每一生成元的矩阵表示等于某一合适的矩阵，通过这些矩阵相乘产生出整个 G_k 群的不可约表示，最后用(10–81a)式构造波矢群的 IR 基.

由于我们只对 $L(\boldsymbol{k})$ 中可能出现的 IR 感兴趣，因此我们不必在 N 维而只要在 N' 维类空间，用 § 3.11 的本征函数法求出 G'_k 群的特征标.

类似于对(10–80b)式和(10–82)式的证明，可以证明 § 3.11 中的式子对 N' 维类空间也成立，即

$$CQ^{(\nu)}=\nu Q^{(\nu)},\qquad Q^{(\nu)}=\sum_{i=1}^{N'}q_i^{(\nu)}C_i,\tag{10–100 a}$$

$$\chi_i^{(\nu)}=\sqrt{g_i}\,q_i^{(\nu)*},\quad \sum_{i=1}^{N'}g_i|q_i^{(\nu)}|^2=1,\tag{10–100 b}$$

$$\lambda_i^{(\nu)}=g_i/h_\nu\,\chi_i^{(\nu)}.\tag{10–100 c}$$

方程 (10–100a), (10–100b) 足以决定 G'_k 群的特征标. 对 230 个空间，N' 最高数目为 11. 因此只要解一个阶数至多为 11 的本征方程，便可得到任一空间群的特征标.

§ 10.18 小　结

现在把本章中所用到的各种群，它们的 IR 及它们间的关系小结如下.

无限群	空间群		波矢群		格群
	G	$\supset$	$G(\boldsymbol{k})$	$\supset$	T
群　元	$\{\alpha\|\boldsymbol{v}(\alpha)+\boldsymbol{R}_n\}$		$\{\gamma\|\boldsymbol{v}(\gamma)+\boldsymbol{R}_n\}$		$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$
IR 基	$u_{k_\sigma,a}^{(\nu)}=\{\beta_\sigma\|\boldsymbol{v}_\sigma\}u_{k,a}^{(\nu)}$		$u_{k,a}^{(\nu)}$		$\exp i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{r}$
IR 矩阵	$\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,\boldsymbol{k})}$		$D_{ba}^{(\nu,\boldsymbol{k})}$		$\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n)$
IR 维数	qh_ν		h_ν		1

有限群:	空点阵的点群		空间群的点群		波矢群的点群	表象群	表象群
	F	$\supset$	G_0	$\supset$	$G_0(\boldsymbol{k})$	G_k	G'_k
群　元			α		γ	$\{\gamma\|\boldsymbol{v}(\gamma)\}$,	$\{\gamma\|\boldsymbol{v}\{\gamma)\}'$

波矢群的点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的定义：$\gamma\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m$

陪集分解：

$$G=\sum_{\sigma=1}^{q}\oplus\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}G(\boldsymbol{k}).$$

$$G_0=\sum_{\sigma=1}^{q}\oplus\beta_\sigma G_0(\boldsymbol{k}).$$

表象群 G_k 和表象群 G_k' 差一规范变换：$\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}\{\gamma|\boldsymbol{v}(\gamma)\}$. G_k 和 G_k' 为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$的覆盖群. $G(\boldsymbol{k})$, G_k 和 G_k' 群的 IR 基都是 $u_{k\sigma a}^{(\nu)}$.

特例：(1) 对原点 $(\boldsymbol{k}=0)$, $G_0(\boldsymbol{k})=G_0$, 波矢 $\boldsymbol{k}$ 具有最高的对称性. $G(\boldsymbol{k})=G$, $G_k'=G_k$.

(2) 对一般点，$G_0(\boldsymbol{k})=\epsilon$, 波矢 $\boldsymbol{k}$ 没有任何对称性，$G(\boldsymbol{k})=T$, $G_k'=G_k=\epsilon$.

(3) 对简单空间群，$G_k=G_k'=G_0(\boldsymbol{k})$, $G(\boldsymbol{k})=G_0(\boldsymbol{k})\times T$. 点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基也就是波矢群的 IR 基. 波矢群的 IR 为 $D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma|\boldsymbol{c}\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}}D^{(\nu)}(\gamma)$, 这里 $D^{(\nu)}(\gamma)$为点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的不可约表示矩阵.

(4) 对非简单空间群，但 $\boldsymbol{k}$ 在布里渊区内部，表象群 G_k' 和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 同构. 它们的不可约矩阵相同，但不可约基则不一定相同. 波矢群的 IR 和点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的 IR 之间的关系为 $D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma|\boldsymbol{c}\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{c}}\,D^{(\nu)}(\gamma)$.

§10.19 空间群的 CG 系数

1. 空间群的 CG 序列

设 $\mathscr{D}^{(\nu,{}^*\boldsymbol{k})}$ 和 $\mathscr{D}^{(\nu',{}^*\boldsymbol{k}')}$ 为空间群的两个不可约表示. 它们的直接乘积可约化为 IR 的直和：

$$\mathscr{D}^{(\nu,{}^*\boldsymbol{k})}\otimes\mathscr{D}^{(\nu',{}^*\boldsymbol{k}')}=\sum_{\boldsymbol{k}''}\sum_{\nu''}\oplus(\nu{}^*\boldsymbol{k}\nu'{}^*\boldsymbol{k}'|\nu''{}^*\boldsymbol{k}'')\mathscr{D}^{(\nu'',{}^*\boldsymbol{k}'')},\tag{10-101}$$

这里 $(\nu{}^*\boldsymbol{k}\nu'{}^*\boldsymbol{k}'|\nu''{}^*\boldsymbol{k}'')$ 为正整数 (相当于第三章中的 $(\nu\nu'\nu'')$). (10-101) 式就是空间群的 CG 序列. 进一步的讨论见 Birman (1974), 谢希德等(1964).

2. 波矢星选择规则

空间群 CG 系数的定义为

$$u_{\boldsymbol{k}''\sigma''a''}^{(\nu'')\theta}=\sum_{\sigma a\sigma' a'}C_{\nu\boldsymbol{k}\sigma a,\nu'\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,\boldsymbol{k}''\sigma''a''}u_{\boldsymbol{k}\sigma a}^{(\nu)}u_{\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu')},\tag{10-102a}$$

$$\theta=1,\ 2,\ \cdots,\ (\nu{}^*\boldsymbol{k}\nu'{}^*\boldsymbol{k}'|\nu''{}^*\boldsymbol{k}'')$$

这里 θ 为多重性指标. (10-102a)之逆展开为

$$u_{\boldsymbol{k}\sigma a}^{(\nu)}u_{\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu')}=\sum_{\nu''\boldsymbol{k}''\sigma''a''\theta}C_{\nu\boldsymbol{k}\sigma a,\nu'\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,\boldsymbol{k}''\sigma''a''}u_{\boldsymbol{k}''\sigma''a''}^{(\nu'')\theta}.\tag{10-102b}$$

CG 系数可表为

$$C_{\nu\boldsymbol{k}\sigma a,\nu'\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,\boldsymbol{k}''\sigma''a''}=\langle u_{\boldsymbol{k}\sigma a}^{(\nu)}u_{\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu')}|u_{\boldsymbol{k}''\sigma''a''}^{(\nu'')\theta}\rangle.\tag{10-103}$$

利用

$$\langle u_{\boldsymbol{k}\sigma a}^{(\nu)}u_{\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu')}|\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}\ u_{\boldsymbol{k}''\sigma''a''}^{(\nu'')\theta}\rangle=e^{-i\boldsymbol{k}''_{\sigma''}\cdot\boldsymbol{R}_n}C$$

$$=\langle\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\}^{-1}(u_{\boldsymbol{k}\sigma a}^{(\nu)}u_{\boldsymbol{k}'\sigma' a'}^{(\nu')})|u_{\boldsymbol{k}''\sigma''a''}^{(\nu'')\theta}\rangle=e^{-i(\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}'_{\sigma'})\cdot\boldsymbol{R}_n}C\tag{10-104}$$

(这里 C 为(10-103)式 CG 系数的缩写), 可知只有

$$\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}'_{\sigma'}-\boldsymbol{k}''_{\sigma''}=\boldsymbol{K}_m\tag{10-105a}$$

时，CG 系数才不为零.

根据(10-105a)式可以引入波矢选择规则(Birman 1974):

$${}^*\boldsymbol{k}\otimes{}^*\boldsymbol{k}'=\sum_{{}^*\boldsymbol{k}''}({}^*\boldsymbol{k}{}^*\boldsymbol{k}'|{}^*\boldsymbol{k}''){}^*\boldsymbol{k}''.\tag{10-105b}$$

正整数$({}^*\boldsymbol{k}{}^*\boldsymbol{k}'|{}^*\boldsymbol{k}'')$称为波矢约化系数，它显然满足

$$({}^*\boldsymbol{k}{}^*\boldsymbol{k}'|{}^*\boldsymbol{k}'')=({}^*\boldsymbol{k}'{}^*\boldsymbol{k}|{}^*\boldsymbol{k}''). \tag{10-105c}$$

设 ${}^*\boldsymbol{k}$, ${}^*\boldsymbol{k}'$ 和 ${}^*\boldsymbol{k}''$ 星中，分别包含 q, q' 和 q'' 个点．由(10-105b)式立即可知

$$q\cdot q'=\sum_{{}^*\boldsymbol{k}''}({}^*\boldsymbol{k}{}^*\boldsymbol{k}'|{}^*\boldsymbol{k}'')q''. \tag{10-105d}$$

$q\cdot q'$ 个波矢 $\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}'_\tau$ 可表为

$$\beta_\sigma(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'_{\sigma'})=\beta_\sigma(\boldsymbol{k}+\beta_{\sigma'}\boldsymbol{k}'),\ \sigma=1,\ 2,\ \cdots,\ q,\ \sigma'=1,\ 2,\ \cdots,\ q'. \tag{10-105e}$$

我们可把这 $q\cdot q'$ 个波矢列成一个矩阵形式的表，其第 q 行、第 q' 列的元素为 $\beta_\sigma(\boldsymbol{k}+\beta_{\sigma'}\boldsymbol{k}')$，并称其为波矢表．若 $\boldsymbol{k}+\beta_{\sigma'}\boldsymbol{k}'$ 属于波矢星 ${}^*\boldsymbol{k}''$，则 $\beta_\sigma(\boldsymbol{k}+\beta_{\sigma'}\boldsymbol{k}')$ 仍属于波矢星 ${}^*\boldsymbol{k}''$．因此波矢表中同一列的所有波矢必属于同一波矢星．由此可见，只要根据波矢表中的某一行(例如第一行)，并利用(10-105d)便可得到波矢选择规则．为了方便起见，我们总是取 $q\geqslant q'$，也就是说，使波矢表的行数大于等于列数．

例 1．求 $W\left(\frac{1}{2}\ \ \frac{1}{4}\ \ \frac{3}{4}\right)\otimes X\left(\frac{1}{2}\ \ 0\ \ \frac{1}{2}\right)$.

$q=6$, $q'=3$. $\boldsymbol{k}'_{\sigma'}=\left(\frac{1}{2}\ \ 0\ \ \frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{2}\ \ \frac{1}{2}\ \ 0\right)$, $\left(0\ \ \frac{1}{2}\ \ \frac{1}{2}\right)$. 由表 10·19-1 及(10-105d)式(注意 Δ 星包含 6 个点)得到波矢选择规则

$$W\otimes X=2\Delta\oplus W. \tag{10-105f}$$

表 10.19-1 $W\otimes X$ 的波矢表

q \ q'	1	2	3
	Δ	Δ	W
1	$\left(0\ \ \frac{1}{4}\ \ \frac{1}{4}\right)$	$\left(0\ \ \frac{3}{4}\ \ \frac{3}{4}\right)$	$\left(\frac{1}{2}\ \ \frac{3}{4}\ \ \frac{1}{4}\right)$
⋮ 6	⋮	⋮	⋮

例 2．求 $\Delta(\alpha\ \ 0\ \ \alpha)\otimes X\left(\frac{1}{2}\ \ 0\ \ \frac{1}{2}\right)$.

$q=6$, $q'=3$, $\alpha\leqslant 1/2$. 由表 10·19-2, (10 105d)以及 Z 星包含 $q''=12$ 个点，可知

$$\Delta\otimes X=\Delta'\oplus Z.$$

表 10.19-2 $\Delta\otimes X$ 的波矢表

q \ q'	1	2	3
	Δ'	Z	Z
1	$\left(\frac{1}{2}+\alpha,\ 0,\ \frac{1}{2}+\alpha\right)$	$\left(\frac{1}{2}+\alpha,\ \frac{1}{2},\ \alpha\right)$	$\left(\alpha,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}+\alpha\right)$
⋮ 6	⋮	⋮	⋮

3. *CG* 系数的计算

令(10-102a)式中 $\sigma''=1$

$$u_{k''a''}^{(\nu'')\theta}=\sum_{\sigma a\sigma' a'} C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''a''} u_{k_\sigma a}^{(\nu)} u_{k'_{\sigma'} a'}^{(\nu')} \tag{10-106a}$$

这里

$$C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''a''} \equiv C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''1a''}. \tag{10-106b}$$

由于 $u_{k''a''}^{(\nu'')\theta}$ 是表象群 $G'_{k''}$ 的 IR 基，它必定是 $G'_{k''}$ 群的 CSCO–II

$$(C,\ C(s))=(C^{k''},\ C^{k''}(s)) \tag{10-107a}$$

的本征函数．类似于(3–293)我们有

$$\sum_{\sigma a\sigma' a'}\left[\left\langle u_{k_\tau b}^{(\nu)} u_{k'_{\tau'} b'}^{(\nu')} \middle| \begin{matrix} C^{k''} \\ C^{k''}(s) \end{matrix} \middle| u_{k_\sigma a}^{(\nu)} u_{k'_{\sigma'} a'}^{(\nu')} \right\rangle - \delta_{\sigma\tau}\delta_{\sigma'\tau'}\delta_{ab}\delta_{a'b'}\begin{pmatrix} \nu'' \\ a'' \end{pmatrix}\right]$$
$$\times C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''a''}=0. \tag{10-107b}$$

这里$(\nu''a'')$代表 $G'_{k''}$ 群 CSCO–II 的本征值．

表象群 $G'_{k''}$ 的群元 $\{\gamma''|\mathbf{c}''\}'$ 在非耦合表象中的矩阵元为

$$M(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}')=e^{ik''\cdot c''}M(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}), \tag{10-108a}$$

$$M_{\tau b\tau' b',\sigma a\sigma' a'}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\})\equiv\langle u_{k_\tau b}^{(\nu)} u_{k'_{\tau'} b'}^{(\nu')}|\{\gamma''|\mathbf{c}''\}|u_{k_\sigma a}^{(\nu)} u_{k'_{\sigma'} a'}^{(\nu')}\rangle$$
$$=\mathscr{D}_{\tau b,\sigma a}^{(\nu,k)}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\})\mathscr{D}_{\tau' b',\sigma' a'}^{(\nu',k')}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}). \tag{10-108b}$$

写成矩阵直接乘积的形式为

$$M(\{\gamma''|\mathbf{c}''\})=\mathscr{D}^{(\nu,k)}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\})\otimes\mathscr{D}^{(\nu',k')}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}). \tag{10-108c}$$

根据(10–89d)式由表象群 G'_k 和 $G'_{k'}$ 的表示矩阵，可算出矩阵 $\mathscr{D}^{(\nu,k)}$ 和 $\mathscr{D}^{(\nu',k')}$．利用(10–108)式算出 $C^{k''}$ 和 $C^{k'}(s)$ 在非耦合表象中的矩阵表示．解本征方程 (10–107b) 式，即可得到 CG 系数．如果本征值 $(\nu''a'')$ 为 d 重根，则表明

$$(\nu^*\boldsymbol{k},\ \nu'^*\boldsymbol{k}'|\nu''^*\boldsymbol{k}'')=d. \tag{10-109}$$

对应于本征值$(\nu''a'')$，可以找到 d 个互相正交的本征矢量

$$U_{k''}^{(\theta)}(a'')=\{C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''a''}\},\quad \theta=1,\ 2,\ \cdots,\ d. \tag{10-110a}$$

这里矢量的分量指标为 $(\sigma a,\ \sigma' a')$．

从这里可以看到，只要知道波矢星选择规则，通过解本征方程可以将 CG 序列和 CG 系数问题同时解决．如果预先知道 CG 序列，则可以将本征值$(\nu''a'')$代入(10–107b)式求出本征矢量，从而省去了求本征值的问题．

初看上去，本征方程 (10–107b) 的阶数为 $(qh_\nu)(q'h_{\nu'})$．由于波矢选择规则 (10–105a)，本征方程(10–107b)的阶数其实远小于 $(qh_\nu)(q'h_{\nu'})$．

位相问题：为了保证不同 a'' 分量的 CG 系数 $C_{\nu k\sigma a,\nu' k'\sigma' a'}^{(\nu'')\theta,k''a''}$ 有正确的相对位相，可利用(3–297)式引进的办法来解决．由于空间群的不可约矩阵元往往很简单，常常为 ±1，$\pm i$ 或 0，上述办法可进一步简化为以下步骤：

假定从本征方程 (10–107b) 已解得 ν'' 表示 a'' 分量的 CG 系数 $U_{k''}^{(\theta)}(a'')$．假定表象群 $G'_{k''}$ 的某个群元 $\{\gamma''|\mathbf{c}\}'$ 的矩阵元

$$|D_{b''a''}^{(\nu'',k'')}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}')|=1, \tag{10-111a}$$

换言之，假定 $\{\gamma''|\mathbf{c}''\}'u_{k''a''}^{(\nu'')}=D_{b''a''}^{(\nu'',k'')}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}')u_{k''b''}^{(\nu'')}$．于是 ν'' 表示 b'' 分量的 CG 系数为

$$U_{k''}^{(\theta)}(b'')=\frac{1}{D_{b''a''}^{(\nu'',k'')}(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}')}M(\{\gamma''|\mathbf{c}''\}')U_{k''}^{(\theta)}(a''). \tag{10-111b}$$

因此只要针对某一特定的 $\nu''a''$，由(10–107b) 解得 $d(=(\nu^*\boldsymbol{k}\nu'^*\boldsymbol{k}'|\nu''^*\boldsymbol{k}''))$ 个互相正交的本征矢量 $U_{k''}^{(\theta)}(a'')$，相继利用(10-111b)式，便可求出同一 ν'' 的所有 $h_{\nu''}$ 个矢量 $U_{k''}^{(\theta)}(b'')$，

$b''=1,\ 2,\ \cdots,\ h_{\nu''}$.

根据(10-85)式，$\sigma''\neq1$ 的 CG 系数

$$U^{(\theta)}_{k''\sigma''}(a'')=\{C^{(\nu'')\theta,k''\sigma''a''}_{\nu k\sigma a,\nu'k'\sigma'a'}\} \tag{10-110b}$$

可通过以下式子从 $\sigma''=1$ 的 CG 系数 $U^{(\theta)}_{k''}(a'')$ 得到：

$$\begin{aligned}U^{(\theta)}_{k''_{\sigma''}}(a'')&=M(\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\})U^{(\theta)}_{k''}(a'')\\&=\mathscr{D}^{(\nu,k)}(\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\})\otimes\mathscr{D}^{(\nu',k')}(\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\})U^{(\theta)}_{k''}(a'').\end{aligned} \tag{10-111c}$$

这里 $\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\}$ 为空间群 G 相对于波矢群 $G(\boldsymbol{k}'')$ 的陪集代表

$$G=\sum_{\sigma''=1}^{q''}\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\}G(\boldsymbol{k}''). \tag{10-112}$$

由(10-111c)式得到 $\sigma''\neq1$ 时的 CG 系数

$$C^{(\nu'')\theta,k''\sigma''a''}_{\nu k\tau b,\nu'k'\tau'b'}=\sum_{aa'}C^{(\nu'')\theta,k''a''}_{\nu k\sigma a,\nu'k'\sigma'a'}\mathscr{D}^{(\nu,k)}_{\tau b,\sigma a}(\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\})\mathscr{D}^{(\nu',k')}_{\tau'b',\sigma'a'}(\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\}). \tag{10-111d}$$

§10.20 空间群 $\mathscr{C}^4_{2v}$

$\mathscr{C}^4_{2v}$ 是一个非简单空间群，$G_0=\mathscr{C}_{2v}$. 其布拉菲格子为简单正交格子，属正交系. 三个互相垂直的初始平移为

$$\boldsymbol{t}_1=a\boldsymbol{i},\ \boldsymbol{t}_2=b\boldsymbol{j},\ \boldsymbol{t}_3=c\boldsymbol{k}, \tag{10-113}$$

空间群的群元为

$$\mathscr{R}_1=\{\epsilon|0\},\ \mathscr{R}_2=\{\sigma^x|\boldsymbol{v}\},\ \mathscr{R}_3=\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\},\ \mathscr{R}_4=\{C_2^z|0\},\qquad \boldsymbol{v}=\frac{1}{2}\boldsymbol{t}_1. \tag{10-114}$$

换句话说，在 z 方向上只有平移对称性，在 xy 平面上原子或离子的分布如图 10·20-1 所示.

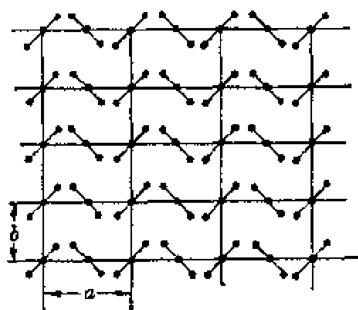


图 10·20-1　xy 平面上原子或离子的分布

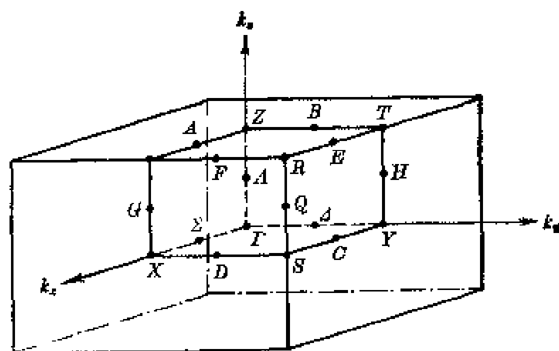


图 10·20-2　简单正交格子的对称元胞

首先求出倒格矢的基矢.

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{2\pi}{a}\boldsymbol{i},\quad \boldsymbol{b}_2=\frac{2\pi}{b}\boldsymbol{j},\quad \boldsymbol{b}_3=\frac{2\pi}{c}\boldsymbol{k}. \tag{10-115}$$

其次画出逆点阵的对称元胞（布里渊区），见图 10·20-2. 布里渊区内各点的记号仍采用 Koster (1957). 下面我们讨论其中的四个点.

(a) 一般的 $\boldsymbol{k}$ 星

根据 §10·16，这时波矢群就等于格群，$G(\boldsymbol{k})=T$，$G_0(\boldsymbol{k})=\epsilon$，表象群的表示 $D^{(k)}(\{\epsilon|0\})=1$. $\mathscr{C}^4_{2v}$ 的陪集代表 $\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$ 就是(10-114)式的 $\mathscr{R}_\sigma$. $\mathscr{C}^4_{2v}$ 的 IR 基为 $u_{k_\sigma}\equiv u_\sigma=\mathscr{R}_\sigma u_k$.

由(10-57a)式得

$$
\begin{aligned}
u_1 &= \{\epsilon|0\}u_k = \exp[2\pi i(\varkappa_1\xi_1+\varkappa_2\xi_2+\varkappa_3\xi_3)],\\
u_2 &= \{\sigma^x|\boldsymbol{v}\}u_1 = e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{v}}\exp[2\pi i(-\varkappa_1\xi_1+\varkappa_2\xi_2+\varkappa_3\xi_3)],\\
u_3 &= \{\sigma^y|\boldsymbol{v}\}u_1 = e^{-i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}_m)\cdot\boldsymbol{v}}\exp[2\pi i(\varkappa_1\xi_1-\varkappa_2\xi_2+\varkappa_3\xi_3)],\\
u_4 &= \{C_2^z|0\}u_1 = \exp[2\pi i\{-\varkappa_1\xi_1-\varkappa_2\xi_2+\varkappa_3\xi_3)].
\end{aligned}
\tag{10-116}
$$

这里假定 $\boldsymbol{k}=\sum_{i=1}^{3}p_i\boldsymbol{b}_i,\ \varkappa_i=p_i+m_i,\ i=1,\ 2,\ 3.$

利用(10-89e)容易求出空间群的 IR 矩阵．幺元素自然对应于单位矩阵．其余群元的表示矩阵为

$$
\mathscr{D}^{(*k)}(\{\epsilon|\boldsymbol{R}_n\})=\begin{pmatrix} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n} & & & 0\\ & e^{-i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{R}_n} & & \\ & & e^{-i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{R}_n} & \\ 0 & & & e^{-i\boldsymbol{k}_4\cdot\boldsymbol{R}_n}\end{pmatrix},
$$

$$
\mathscr{D}^{(*k)}(\{\sigma^x|\boldsymbol{v}\})=\left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & & 0 \\ \hline & 0 & 0 & 1\\ & & 1 & 0\end{array}\right),
$$

$$
\mathscr{D}^{(*k)}(\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\})=\left(\begin{array}{cc|cc} & 0 & e^{-2i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}} & 0 \\ & & 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 & & 0\\ 0 & e^{2i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}} & & \end{array}\right),
$$

$$
\mathscr{D}^{(*k)}(\{C_2^z|0\})=\left(\begin{array}{cc|cc} & 0 & 0 & 1 \\ & & e^{-2i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}} & 0 \\ \hline 0 & e^{2i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}} & & 0\\ 1 & 0 & & \end{array}\right),
\tag{10-117}
$$

这里 $\boldsymbol{k}_2=-p_1\boldsymbol{b}_1+p_2\boldsymbol{b}_2+p_3\boldsymbol{b}_3,\ \boldsymbol{k}_3=p_1\boldsymbol{b}_1-p_2\boldsymbol{b}_2+p_3\boldsymbol{b}_3,\ \boldsymbol{k}_4=-p_1\boldsymbol{b}_1-p_2\boldsymbol{b}_2+p_3\boldsymbol{b}_3.$

(b) 原点 $\Gamma(\boldsymbol{k}=0)$．

现在 $G_0(\boldsymbol{k})$ 就是空间群的点群 $\mathscr{C}_{2v}$，波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 就是空间群本身．由于 $\boldsymbol{k}=0$，$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\equiv 1$，现在表象群 $G_k'=G_k$．根据§10.16，表象群 $G_k=(\{\epsilon|0\},\ \{\sigma^x|\boldsymbol{v}\},\ \{\sigma^y|\boldsymbol{v}\},\ \{C_2^z|0\})$ 和点群 $\mathscr{C}_{2v}=(\epsilon,\ \sigma^x,\ \sigma^y,\ C_2^z)$ 同构．由(10-76)式或令(10-116)式中的 $p_i=0$ 得到表象群 G_k' 的正则表示基底

$$
\begin{aligned}
u_1 &= \exp[2\pi i(m_1\xi_1+m_2\xi_2+m_3\xi_3)],\\
u_2 &= \exp[2\pi i(-m_1\xi_1+m_2\xi_2+m_3\xi_3)]e^{m_1\pi i},\\
u_3 &= \exp[2\pi i(m_1\xi_1-m_2\xi_2+m_3\xi_3)]e^{-m_1\pi i},\\
u_4 &= \exp[2\pi i(-m_1\xi_1-m_2\xi_2+m_3\xi_3)].
\end{aligned}
\tag{10-118}
$$

由表 8.3-2 知道，$\mathscr{C}_{2v}$ 群的 CSCO 为$(C_2^z,\ \sigma^y)$，容易求得 C_{2v} 的 IR，列在表 10.20-1（此即 $\mathscr{C}_{2v}$ 群的特征标表）根据(10-97)式，立刻得到波矢群 $G(\boldsymbol{k})$（对本例亦即空间群）的 IR，列

表 10.20-1 $\mathscr{C}_{2v}$ 的不可约表示

ν	ϵ	C_2^z	σ^y	σ^x
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1

表 10.20-2 C_{2v}^4 群在 Γ 点的 IR $\mathscr{D}^{(\nu,\Gamma)}$

ν	$\{\epsilon\|0\}$	$\{C_2^z\|0\}$	$\{\sigma^y\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\sigma^x\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1	1
B_1	1	-1	1	-1	1
B_2	1	-1	-1	1	1

在表 10.20-2.

由(10-81b)式、(10-82)式及表 10.20-2, 立即得到空间群 $\mathscr{C}_{2v}^4$ 的四个一维 IR 基

$$
\begin{aligned}
u^{A_1}=u^{(1,1)}&=\frac{1}{4}(u_1+u_2+u_3+u_4)=\begin{cases}\cos\mu_1\xi_1\cos\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3} \\ \sin\mu_1\xi_1\sin\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3},\end{cases} \quad 当\ m_1=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix}, \\
u^{A_2}=u^{(1,-1)}&=\frac{1}{4}(u_1+u_2-u_3-u_4)=\begin{cases}\cos\mu_1\xi_1\sin\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3} \\ \sin\mu_1\xi_1\cos\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3},\end{cases} \quad 当\ m_1=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix}, \\
u^{B_1}=u^{(-1,1)}&=\frac{1}{4}(u_1-u_2+u_3-u_4)=\begin{cases}\sin\mu_1\xi_1\cos\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3} \\ \cos\mu_1\xi_1\sin\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3},\end{cases} \quad 当\ m_1=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix}, \\
u^{B_2}=u^{(-1,-1)}&=\frac{1}{4}(u_1-u_2-u_3+u_4)=\begin{cases}\sin\mu_1\xi_1\sin\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3} \\ \cos\mu_1\xi_1\cos\mu_2\xi_2 e^{i\mu_3\xi_3},\end{cases} \quad 当\ m_1=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix},
\end{aligned}
\tag{10-119}
$$

这里

$$\mu_i=2\pi m_i.$$

注意 虽然表象群 G_k 的 IR 矩阵和点群 $\mathscr{C}_{2v}$ 的 IR 矩阵完全一样,但它们的 IR 基不一定相同. 例如由(10-119)看到,只有当 m_1 为偶数时,两者才相同.

(c) Σ 点.

Σ 点为布里渊区内部 k_x 轴上的任意一点, $\boldsymbol{k}=p_1\boldsymbol{b}_1$. 波矢群的点群 $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_s=(\epsilon,\ \sigma^y)$. 和它同构的表象群 $G_k'=(\{\epsilon|0\},\ \{\sigma^y|\boldsymbol{v}\}')$. G_k' 群的 IR 和 $\mathscr{C}_s$ 群的相同. G_k' 群的正则表示基底为 $R_1=\{\epsilon|0\}$ 和 $R_2=\{\sigma_y|\boldsymbol{v}\}'$, 或

$$
\begin{aligned}
&u_1=\exp[2\pi i((p_1+m_1)\xi_1+m_2\xi_2+m_3\xi_3)], \\
&u_2=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\}u_1=e^{m_1\pi i}\exp[2\pi i((p_1+m_1)-m_2\xi_2+m_3\xi_3)].
\end{aligned}
\tag{10-120}
$$

根据 C_s 群的特征标,立即得到波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基为:

$$
\begin{aligned}
u_1^A=u_k^A&=\frac{1}{2}(u_1+u_2)=\exp[2\pi i((p_1+m_1)\xi_1+m_3\xi_3)]\begin{cases}\cos(2\pi m_2\xi_2) \\ i\sin(2\pi m_2\xi_2),\end{cases} \quad 对\ m=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix} \\
u_1^B=u_k^B&=\frac{1}{2i}(u_1-u_2)=\exp[2\pi i((p_1+m_1)\xi_1+m_3\xi_3)]\begin{cases}\sin(2\pi m_2\xi_2) \\ (-i)\cos(2\pi m_2\xi_2).\end{cases} \quad 对\ m=\begin{matrix}偶\\奇\end{matrix}
\end{aligned}
\tag{10-121}
$$

利用(10-85)式,得出空间群 G 的 IR 基.

$$IR(A,\ {}^*\boldsymbol{k}):\ u_1^A,\ u_2^A=\{C_2^z|0\}u_1^A; \tag{10-122}$$

$$IR(B,\ {}^*\boldsymbol{k}):\ u_1^B,\ u_2^B=\{C_2^z|0\}u_2^B. \tag{10-123}$$

根据点群的 IR $D^A(\sigma^y)=1$, $D^B(\sigma^y)=-1$, 由(10-97)式得到波矢群的 IR:

$$D^{(A,k)}(\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\})=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}},\ D^{(B,k)}(\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\})=-e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}. \tag{10-124}$$

空间群的 IR 可由(10-89e)式计算.

例如

$$\mathscr{D}_{2,2}^{(A,k)}(\{\sigma^y|\boldsymbol{v}\})=D^{(A,k)}(\{\sigma^y|-\boldsymbol{v}\})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}. \tag{10-125}$$

$\mathscr{C}_{2v}^4$ 群在 Σ 点的不可约矩阵列在表 10·20-3.

表 10.20-3 $\mathscr{C}_{2v}^4$ 群在 Σ 点的 **IR** 矩阵

	$\{\epsilon\|0\}$	$\{\sigma^x\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\sigma^y\|\boldsymbol{v}\}$	$\{C_2^z\|0\}$	$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$
$\mathscr{D}^{(A,\Sigma)}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\\e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}},&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}&0\\0&e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n},&0\\0&e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}\end{pmatrix}$
$\mathscr{D}^{(B,\Sigma)}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\\-e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}},&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}&0\\0&-e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n},&0\\0&e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}\end{pmatrix}$

1) $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}=e^{-p_1\pi i}$.

(d) X 点.

X 点($p_1=1/2,\ p_2=p_3=0$)在 k_x 轴上并在布里渊区界面上，它是一个对称点 (point of symmetry)，需考虑表象群 G_k 或 G_k'，我们取后者. 波矢群的点群 $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$. 因此波矢群就是空间群本身.

首先根据(10-70)式，即

$$\begin{gathered}\{\gamma_1|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}'\{\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}'=\eta_{12}'\{\gamma_1\gamma_2|\boldsymbol{v}(\gamma_1\gamma_2)\}',\\ \eta_{12}'=\exp[-i\boldsymbol{K}_{\gamma_1}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_2)],\ \boldsymbol{K}_{\gamma_1}=\gamma_1^{-1}\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k},\end{gathered} \tag{10-126}$$

作出 G_k' 群的乘法表. 由于现在非初始平移 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{t}_1/2$ 或 0，所以 G_k' 是点群 $\mathscr{C}_{2v}$ 的二重覆盖群. 我们只要在点群 $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{2v}$ 的乘法表上，考虑相因子 η_{12}' 就可得到表象群 G_k' 的乘法表. 表 10·20-4 中第一列给出了格矢 $\boldsymbol{K}_{\gamma_1}$. 于是立刻可知，除 $R_2R_2=-R_1,\ R_2R_3=-R_4,\ R_4R_2=-R_3$ 和 $R_4R_3=-R_2$ 外(这里 $R_i=\{\gamma_i|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'$)，其余乘法关系和点群 $\mathscr{C}_{2v}$ 完全一样. G_k' 群的乘法关系列在表 10.20-4 (前面说过，只要列出 $R_1,\cdots,R_4$ 的乘法关系就够了，其余乘法关系可由(10-77)式给出).

表 10.20-4 $\mathscr{C}_{2v}$ 的二重覆盖群 G_k' 的乘法表

$\boldsymbol{K}_{\gamma_1}$	$\{\gamma_1\|\boldsymbol{v}(\gamma_1)\}'$ \ $\{\gamma_2\|\boldsymbol{v}(\gamma_2)\}'$	R_1 $\{\epsilon\|0\}$	R_2 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\{\sigma^x\|\boldsymbol{v}\}$	R_3 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\{\sigma^y\|\boldsymbol{v}\}$	R_4 $\{C_2^z\|0\}$
0	R_1	R_1	R_2	R_3	R_4
$\boldsymbol{t}_1$	R_2	R_2	R_1'	R_4'	R_3
0	R_3	R_3	R_4	R_1	R_2
$\boldsymbol{t}_1$	R_4	R_4	R_3'	R_2'	R_1

根据(10-76)，表象群 G_k' 的可约基矢

$$\begin{aligned}u_1&=R_1u_k=\exp[2\pi i((m_1+1/2)\xi_1+m_2\xi_2+m_3\xi_3)],\\u_2&=R_2u_k=(-1)^{m_1+1}\exp[2\pi i(-m_1-1/2)\xi_1+m_2\xi_2+m_3\xi_3)],\\u_3&=R_3u_k=(-1)^{m_1}\exp[2\pi i((m_1+1/2)\xi_1-m_2\xi_2+m_3\xi_3)],\\u_4&=R_4u_k=\exp[2\pi i(-m_1-1/2)\xi_1-m_2\xi_2+m_3\xi_3)].\end{aligned} \tag{10-127}$$

它们张开的空间记为 $L(\boldsymbol{k})$.

由乘法表 10.20-4 立即可知，G_k' 群共有五个类，其类算符为

$$C_1=R_1,\ C_2=R_1',\ C_3=R_2+R_2',\ C_4=R_3+R_3',\ C_5=R_4+R_4', \tag{10-128}$$

由于在 $L(\boldsymbol{k})$ 空间中, $\bar{R}_1=-R_1$, 所以 $C_1=-C_2$, $C_3=C_4=C_5=0$. 因此只有一个线性独立的类算符, $N'=1$. 根据前面讨论, $L(\boldsymbol{k})$ 只包含一个不等价的不可约表示, 其维数由(10-79b)式决定, 即 $h_\nu=\sqrt{g_l}=2$. 我们用点群中的记号 E 代表这个两维表示. 该表示在 $L(\boldsymbol{k})$ 中出现两次. 为了进一步确定 IR 基, 选子群 $\mathscr{C}_2=(\epsilon,\ R_4)$ 作为 $G'(s)$. $(C(s),\ \bar{C}(s))=(R_4,\ \bar{R}_4)$ 为 $L(\boldsymbol{k})$ 空间中的完备算符集. 由表 10.20-4 第四行得到 R_4 的矩阵表示 (参考(2-71a)式和(3-136)式),

$$D(R_4)=\{4\bar{3}21\}=\left(\begin{array}{cc|cc} & & 0 & 1\\ \multicolumn{2}{c|}{0} & -1 & 0\\ \hline 0 & -1 & & \\ 1 & 0 & \multicolumn{2}{c}{0} \end{array}\right), \tag{10-129}$$

由表 10.20-4 第四列得到 $\bar{R}_4$ 的矩阵表示

$$D(\bar{R}_4)=\{4321\}=\left(\begin{array}{cc|cc} & & 0 & 1\\ \multicolumn{2}{c|}{0} & 1 & 0\\ \hline 0 & 1 & & \\ 1 & 0 & \multicolumn{2}{c}{0} \end{array}\right). \tag{10-130}$$

将它们对角化, 就得到波矢群(在这里也就是空间群)的两个 E 表示的 IR 基, $u_a^{(\nu)b}$, b 为内察量个数, 用以区分两个等价的表示

$$\begin{aligned} &u_1^{(E)1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(u_1+u_4),\quad u_{-1}^{(E)1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2+u_3),\\ &u_1^{(E)-1}=-\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2-u_3),\quad u_{-1}^{(E)-1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(u_1-u_4). \end{aligned} \tag{10-131a}$$

利用(10-82)式得到 G'_k 群的矩阵表示

$$\begin{aligned} &D(R_1)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad D(R_2)=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\\ &D(R_3)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad D(R_4)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{10-131b}$$

位相问题: u_1 前面的系数必须为正值, 因此 $u_1^{(E)1}$ 和 $u_{-1}^{(E)-1}$ 的位相没有选择的余地. $u_{-1}^{(E)1}$ 和 $u_1^{(E)-1}$ 这两个本征解中, 其中一个的位相可以任意选, 而另一个则不能任意选. 例如若 $u_{-1}^{(E)1}$ 选为 $\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2+u_3)$, $u_1^{(E)-1}$ 选为 $\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2-u_3)$, 而仍旧使用 (10-82) 式求矩阵元的话, 结果会导致 $D(R_2)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$, $D(R_3)=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$, $(D^2(R_2))^2=1$, $(D(R_3))^2=-1$, 和表 10.20-4 的乘法关系不一致. 不过我们也可以选 $u_{-1}^{(E)'1}=-\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2+u_3)$, $u_1^{(E)'-1}=\sqrt{\frac{1}{2}}(u_2-u_3)$. 这时(10-132)式中的 $D(R_2)$ 和 $D(R_3)$ 分别变为

$$D'(R_2)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix},\quad 和\quad D'(R_3)=\begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}.$$

再根据(10-74)得到波矢群(在本例也就是空间群)的 IR, 列在表 10.20-5.

表 10.20-5　$\mathscr{C}_{4v}^2$ 群在 X 点的 IR 矩阵

	$\{\epsilon\|0\}$	$\{\sigma^x\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\sigma^y\|\boldsymbol{v}\}$	$\{C_2^z\|0\}$	$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$
$\mathscr{Q}^{(E,X)}$	$\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$	$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\begin{pmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{pmatrix}$	$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$	$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{pmatrix}$

$e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}}=e^{-\pi i/2}=-i,\ e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_n}=e^{-n_1\pi i}=(-1)^{n_1}$

倘使用特征标方法来构造不可约表示，其步骤如下．因为 $N'=1$，表象群的 CSCO $C=C_1$．其本征矢量为 $Q^{(\nu)}=C_1$．C_1 的特征标 $\chi_1^{(\nu)}=\sqrt{g_l}\,q_1^{(\nu)*}=2$．由 (10-128) 式可得到其它元素的特征标：$\chi^{(\nu)}(R_1')=-2$, $\chi^{(\nu)}(R_2)=\chi^{(\nu)}(R_3)=\chi^{(\nu)}(R_4)=0$．

根据 $R_2^2=-1$ 和 $R_3^2=1$，R_2 和 R_3 的矩阵表示可选为

$$D(R_2)=\begin{pmatrix}0 & -1\\1 & 0\end{pmatrix},\quad D(R_3)=\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix},$$

由它们相乘可得到 $D(R_4)$ 等．

§10.21　空 间 群 O_h^3

作为更复杂一些的例子，我们来讨论 O_h^3 群 T 点和 R 点的不可约表示 [1]．O_h^3 属于简单立方晶格，是非简单空间群．它的生成元为

$$\{C_{2x}|0\},\ \{C_{2z}|0\},\ \{C_{2a}|\boldsymbol{v}\},\ \{C_{31}^+|0\},\ \{I|0\},\ \boldsymbol{v}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2+\boldsymbol{t}_3).\qquad(10\text{-}132)$$

为了便于跟 Bradley 和 Cracknell 结果相比较，这里以及后面我们改用他们所用的点群算符记号．后面表 10.24-1 给出了记号对照表．

(1) T 点：由图 10·16-1 知 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2+p\boldsymbol{b}_3$, $0<p<1/2$. T 点为界面上的点．波矢群的点群为 $G_0(\boldsymbol{k})=\mathscr{C}_{4v}$．表象群 G_k' 为 $\mathscr{C}_{4v}$ 的二重覆盖群．利用表 10.24-1 给出的点群 O 的乘法表以及(10-70)式可得到表象群的乘法表，列在表 10.21-1．

表 10.21-1　$\mathscr{C}_{4v}$ 的二重覆盖群 G_k' 的乘法表

$-\boldsymbol{K}_\gamma$	$\{\gamma\|\boldsymbol{v}(\gamma)\}'$	R_1 $\{\epsilon\|0\}$	R_2 $\{C_{2z}\|0\}$	R_3 $\{\sigma_x\|0\}$	R_4 $\{\sigma_y\|0\}$	R_5 $\{C_{4z}^+\|\boldsymbol{v}\}'$	R_6 $\{C_{4z}^-\|\boldsymbol{v}\}'$	R_7 $\{\sigma_{da}\|\boldsymbol{v}\}'$	R_8 $\{\sigma_{db}\|\boldsymbol{v}\}'$
(0, 0, 0)	R_1	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5	R_6	R_7	R_8
(1, 1, 0)	R_2	R_2	R_1	R_4	R_3	R_6	R_5	R_8	R_7
(1, 0, 0)	R_3	R_3	R_4	R_1	R_2	R_8'	R_7'	R_6'	R_5'
(0, 1, 0)	R_4	R_4	R_3	R_2	R_1	R_7'	R_8'	R_5'	R_6'
(0, 1, 0)	R_5	R_5	R_6	R_7	R_8	R_2'	R_1'	R_4'	R_3'
(1, 0, 0)	R_6	R_6	R_5	R_8	R_7	R_1'	R_2'	R_3'	R_4'
(1, 1, 0)	R_7	R_7	R_8	R_5	R_6	R_3	R_4	R_1	R_2
(0, 0, 0)	R_8	R_8	R_7	R_6	R_5	R_4	R_3	R_2	R_1

由上表可知 16 阶群 G_k' 共有 $N=10$ 个类，其类算符为

$$C_1=R_1,\ C_2=R_2,\ C_3=R_5+R_6',\ C_4=R_3+R_4',\ C_5=R_7+R_8',$$

1) 叶崇远和吴以勤[43]用本征函数法计算了 O_h^3 群 M 点的不可约表示．

以及 $C_i' = -C_i$, $i=1, 2, \cdots, 5$. 因此只有 5 个线性独立的类算符. 由前面讨论可知, G_k' 群的 8 维可约表示可分解成 5 个不等价的 IR. 满足(10-79b)式的唯一可能是

$$8=1+1+1+1+2^2$$

即可分解为四个一维表示和两个二维表示.

由表 8.3-6 知, $\mathscr{C}_{4v}$ 群的 CSCO 为$(C_{4z}^+ + C_{4z}^-, \sigma_x + \sigma_y)$. 类似地,我们取 $\mathscr{C}_{4v}$ 的覆盖群的 CSCO 为 $C=(C_3, C_4)$. 选 $C(s)=R_3$. 利用乘法表 10.21-1 容易求出算符集 $(C, C(s), \bar{C}(s))$ 在空间 $\{R_i\}$ 中的表示矩阵,对角化后即得到波矢群的 IR 基. 结果列在表 10.21-2.

表 10.21-2 O_h^1 群在 T 点的波矢群的 IR 基和表象群的 IR 矩阵

(C_3, C_4)		N	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5	R_6	R_7	R_8
2, 2	u^{A_1}	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1
2, −2	u^{A_2}	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	−1	1	1	−1	−1	1
−2, 2	u^{B_1}	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	1	−1	−1	1	−1	1
−2, −2	u^{B_2}	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	−1	1	−1	1	1	−1
0, 0	$u_1^{(E)1}$	$\frac{1}{2}$	1	1	1	1	0	0	0	0
0, 0	$u_{-1}^{(E)1}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0	1	1	1	1
0, 0	$u_1^{(E)-1}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0	−1	−1	1	1
0, 0	$u_{-1}^{(E)-1}$	$\frac{1}{2}$	1	1	−1	−1	0	0	0	0
$D^{(E,k)}(R_i)$			$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$

表中 N 为归一系数. 对一维表示, 将表中对应于 R_i 的 IR 矩阵乘以 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma)}=e^{-i\pi(p+1)}$ 就得到波矢群的不可约表示.

(2) R 点: $\boldsymbol{k}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3)$.

$G_0(k)=O_h$. 波矢群 $G(k)$ 就是空间群 O_h^1 本身. $G(\boldsymbol{k})$ 群中伴有非初始平移的元素为

$$C_{4x}^{\pm},\ C_{4y}^{\pm},\ C_{4z}^{\pm},\ C_{2a},\ C_{2b},\ C_{2c},\ C_{2d},\ C_{2e},\ C_{2f}$$

以及它们和反演 $\{I|0\}$ 的积.

表象群 G_k' 为 O_h 的二重覆盖群. 由表 10.24-1 以及(10-70)式可得到表象群 G_k' 的乘法表. G_k' 群有四个线性独立的类算符

$$C_1=e \qquad C_2=C_{2x}+C_{2y}+C_{2z},$$

$$C_3=\sum_{i=1}^{4}(C_{3i}^{+}+C_{3i}^{-}), \qquad C_4=\sum_{i=1}^{4}(C_{3i}^{+}-C_{3i}^{-}\cdot I),$$

它们都不伴有非初始平移. 它们的乘法关系列在表 10.21-3. 容易求得 G_k' 群的 CSCO 为 $C=(C_2, C_4)$. C 的本征值和不可约特征标(即 C 的本征矢的复共轭)列在表 10.21-4.

由表 10.21-4 第一列看到 $48=2^2+2^2+2^2+6^2$. 对二维表示可选 $C(s)=C_{2x}$ 或 C_{2y}, 而对六维表示选

表 10.21-3 类算符乘法表

C_1	C_2	C_3	C_4
C_2	$3C_1+2C_2$	$3C_3$	$3C_4$
C_3	$3C_3$	$4C_2+8C_1+8C_2$	$-4C_4$
C_4	$3C_4$	$-4C_4$	$4C_3-8C_1-8C_2$

表 10.21-4 O_h^7 R 点表象群 G_k^7 的特征标

(C_2, C_4)	C_1	C_2	C_3	C_4
(3, 0)	2	2	2	0
$(3, 4\sqrt{3}i)$	2	2	-1	$\sqrt{3}i$
$(3, -4\sqrt{3}i)$	2	2	-1	$-\sqrt{3}i$
$(-1, 0)$	6	-2	0	0

$$C(s)=(C_{2x},\ C_{2y},\ I),$$

它有以下六组本征值：

$$(1\ -1\ 1),\ (1\ -1\ -1),\ (-1\ 1\ 1),\ (-1\ 1\ -1),\ (-1\ -1\ 1),\ (-1\ -1\ -1).$$

容易求得 G_k^7 群 CSCO-III$(C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$ 的共同本征矢量，其位相由 § 3.8 第 5 小节的方法决定. 由这些本征矢量(一共有 36 个本征矢量)可立即写下不可约矩阵：

$$\{\epsilon|0\}=(123456),\ \{C_{2x}|0\}=(12\bar{3}\bar{4}\bar{5}\bar{6}),\ \{C_{2y}|0\}=(\bar{1}\bar{2}34\bar{5}\bar{6}),\ \{C_{2z}|0\}=(\bar{1}\bar{2}\bar{3}\bar{4}56),$$
$$\{C_{4x}^-|\boldsymbol{v}\}'=(2\bar{1}\bar{6}\bar{5}\bar{4}\bar{3}),\ \{C_{4y}^-|\boldsymbol{v}\}'=(6\bar{5}43\bar{2}1),\ \{C_{4z}^-|\boldsymbol{v}\}'=(43216\bar{5}),\ \{C_{4x}^+|\boldsymbol{v}\}'=(2\bar{1}6543),$$
$$\{C_{4y}^+|\boldsymbol{v}\}'=(\bar{6}\bar{5}432\bar{1}),\ \{C_{4z}^+|\boldsymbol{v}\}'=(\bar{4}\bar{3}2\bar{1}65),\ \{C_{31}^-|0\}=(561\bar{2}\bar{3}\bar{4}),\ \{C_{32}^-|0\}=(\bar{5}\bar{6}1\bar{2}\bar{3}\bar{4}),$$
$$\{C_{33}^-|0\}=(\bar{5}6\bar{1}234),\ \{C_{34}^-|0\}=(56\bar{1}\bar{2}34),\ \{C_{31}^+|0\}=(3\bar{4}\bar{5}\bar{6}12),\ \{C_{32}^+|0\}=(\bar{3}\bar{4}\bar{5}6\bar{1}\bar{2}),$$
$$\{C_{33}^+|0\}=(\bar{3}4\bar{5}\bar{6}\bar{1}\bar{2}),\ \{C_{34}^+|0\}=(\bar{3}4\bar{5}612),\ \{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}'=(\bar{4}32\bar{1}65),\ \{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}'=(43\bar{2}\bar{1}65),$$
$$\{C_{2c}|\boldsymbol{v}\}'=(6\bar{5}\bar{4}\bar{3}2\bar{1}),\ \{C_{2d}|V\}'=(\bar{2}165\bar{4}\bar{3}),\ \{C_{2e}|\boldsymbol{v}\}'=(\bar{6}54\bar{3}\bar{2}1),\ \{C_{2f}|\boldsymbol{v}\}'=(\bar{2}16\bar{5}43).$$
(10–133)

这里我们用了缩写记号，如$(\bar{3}45\bar{6}\bar{1}\bar{2})$代表以下矩阵

$$(\bar{3}45\bar{6}\bar{1}\bar{2})=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{10–134}$$

将上述 24 个矩阵乘以 $I=(1\bar{2}3\bar{4}56)$ 就可得到另外 24 个矩阵.

§ 10.22 空 间 群 O_h^7

最后我们考虑 O_h^7 群 W 点 $(\boldsymbol{k}=\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_1+\frac{1}{4}\boldsymbol{b}_2+\frac{3}{4}\boldsymbol{b}_3)$ 的 IR. O_h^7 为面心立方非简单空间群. 其生成元为

$$\{C_{2x}|0\},\ \{C_{2z}|0\},\ \{C_{31}^+|0\},\ \{C_{2c}|\boldsymbol{v}\},\ \{I|\boldsymbol{v}\};\ \boldsymbol{v}=\frac{1}{4}(\boldsymbol{b}_1+\boldsymbol{b}_2+\boldsymbol{b}_3).$$

波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群为

$$G_0(\boldsymbol{k})=D_{2d}=(\epsilon,\ C_{2x},\ C_{2d},\ C_{2f},\ \sigma_y,\ \sigma_z,\ S_{4x}^-,\ S_{4x}^+).$$

我们利用以下式子来求 $K_\gamma=\gamma^{-1}\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}$：

$$\gamma^{-1}\boldsymbol{k}=\sum_i p_i\gamma^{-1}\boldsymbol{b}_i=\boldsymbol{p}\cdot\gamma^{-1}\boldsymbol{b}=\gamma\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{b}. \tag{10–135a}$$

这里 $\qquad \boldsymbol{p}=(p_1,\ p_2,\ p_3),\ \boldsymbol{b}=(\boldsymbol{b}_1,\ \boldsymbol{b}_2,\ \boldsymbol{b}_3).$

显然，向量(p_1, p_2, p_3)在转动下的变换性质和$(\boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2, \boldsymbol{t}_3)$相同. 将表 10.24-2 表头为面心立方的一栏中，$\boldsymbol{t}_i$ 换成 p_i，就得到以下结果($\gamma\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'$).

$$
\begin{aligned}
&\epsilon\boldsymbol{p}=(p_1,\ p_2,\ p_3),\ C_{2x}\boldsymbol{p}=(-p_1,\ p_1+p_3,\ -p_1+p_2);\\
&C_{2d}\boldsymbol{p}=(p_1,\ p_1-p_2,\ p_1-p_3),\ C_{2f}\boldsymbol{p}=(-p_1,\ -p_3,\ -p_2),\\
&\sigma_y\boldsymbol{p}=(p_1-p_3,\ p_2,\ p_2-p_1),\ \sigma_z\boldsymbol{p}=(p_3-p_2,\ p_3-p_1,\ p_3),\\
&S_{4x}^{-}\boldsymbol{p}=(-p_2+p_3,\ p_1-p_2,\ -p_2),\ S_{4x}^{+}\boldsymbol{p}=(p_2-p_3,\ -p_3,\ p_1-p_3).
\end{aligned}
\tag{10-135b}
$$

由(10-70c)式和(10-135)式容易算出相因子 $\eta'(R_i)=\exp(-i\boldsymbol{K}_{\gamma_i}\cdot\boldsymbol{v})$，列在表 10.22-1 第一列.

表象群 G'_k 为 D_{2d} 的四重覆盖群，其群表列在 10.22-1.

表 10.22-1 表象群 G'_k(D_{2d} 的四重覆盖群)的群表

η'	$\{\epsilon\|0\}'$	$\{C_{2x}\|0\}'$	$\{C_{2d}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{C_{2f}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_y\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_z\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{S_{4x}^{-}\|0\}'$	$\{S_{4x}^{+}\|0\}'$
1	1	2	3	4	5	6	7	8
−1	2	1	−4	−3	−6	−5	8	7
i	3	4	$i1$	$i2$	$i7$	$i8$	5	6
$-i$	4	3	$-i2$	$-i1$	$-i8$	$-i7$	6	5
−1	5	6	−8	−7	−1	−2	4	3
1	6	5	7	8	2	1	3	4
i	7	8	$i6$	$i5$	$i3$	$i4$	2	1
$-i$	8	7	$-i5$	$-i6$	$-i4$	$-i3$	1	2

表象群包含 14 个类，类算符为

$$
\begin{aligned}
&C_1=R_1,\ C'_1=iR_1,\ C''_1=-iR_1,\ C'''_1=-R_1,\\
&C_2=R_2-R_2,\ C'_2=iC_2,\ C_3=R_3-R_3+iR_4-iR_4,\\
&C'_3=iC_3,\ C_4=R_5-R_5+iR_6-iR_6,\ C'_4=iC_4,\\
&C_5=R_7+iR_8,\ C'_5=iC_5,\ C''_5=-iC_5,\ C'''_5=-C_5,
\end{aligned}
\tag{10-136}
$$

其中只有 C_1 和 C_5 是线性独立的. 故 $N'=2$. $8=2^2+2^2$. 因此由 $R_1, \cdots, R_8$ 为基的八维表示空间可约化成两个两维不等价 IR，每个 IR 都出现两次. 选

$$(C(s),\ \bar{C}(s))=(R_7,\ \bar{R}_7)$$

它们的共同本征矢量列在表 10.22-2. 它们的 8 组本征值全都没有简并，因此这里我们不必考虑表象群的 CSCO-I. 这正是选$(C(s),\ \bar{C}(s))=(R_7,\ \bar{R}_7)$的好处. 如果选$(C,\ C(s))=(R_2,\ \bar{R}_2)$，则它至多只有四组不同的本征值，不能完全区分开 8 个不可约基，这时就必须引入 CSCO-I.

波矢群中有非初始平移的元素的矩阵表示为

$$D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}\})=e^{-3\pi i/4}D^{(\nu,k)}(\{\gamma|\boldsymbol{v}\}').$$

将表 10.22-2 和 Bradley 等的著作上的结果(p. 128)相比，可知特征标以及 $\{S_{4x}^{+}|0\}$ 的表示矩阵都是一致的，但 $\{C_{2f}|\boldsymbol{v}\}$ 的表示矩阵有差别. 这差别是由于位相选取而引起的. 若将表 10.22-2 中的不可约基矢作如下变换:

$$
\begin{aligned}
&u_i^{(\nu)1}\to\omega^* u_i^{(\nu)1},\\
&u_1^{(\nu)i}\to -i\omega^* u_1^{(\nu)i},
\end{aligned}
\quad \omega=e^{ik\cdot v}=e^{3\pi i/4},\ \nu=W_1,\ W_2.
$$

则由表 10.22-2 及 (10-72a) 式得到波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的新的不可约基，列在表 10.22-3. 它和 Bradley 等的结果完全一致.

表 10.22-2 O_h^7 群 W 点表象群 G_k' 的 IR 基和表象群的 IR 矩阵

		$\{\epsilon\|0\}'$ R_1	$\{C_{2x}\|0\}'$ R_2	$\{C_{2z}\|\boldsymbol{v}\}'$ R_3	$\{C_{2f}\|\boldsymbol{v}\}'$ R_4	$\{\sigma_y\|\boldsymbol{v}\}'$ R_5	$\{\sigma_z\|\boldsymbol{v}\}'$ R_6	$\{S_{4x}^-\|0\}'$ R_7	$\{S_{4x}^+\|0\}'$ R_8
$u_1^{(W_1)1}$	D_{11}^*	1	1					1	1
$u_2^{(W_1)1}$	D_{21}^*			1	1	1	1		
$u_1^{(W_1)i}$	D_{12}^*			$-i$	i	-1	1		
$u_2^{(W_1)i}$	D_{22}^*	1	-1					$-i$	i
$u_{-1}^{(W_2)-1}$	D_{11}^*	1	1					-1	-1
$u_{-2}^{(W_2)-1}$	D_{21}^*			1	1	-1	-1		
$u_{-1}^{(W_2)-i}$	D_{12}^*			$-i$	i	1	-1		
$u_{-2}^{(W_2)-i}$	D_{22}^*	1	-1					i	$-i$
$D^{(W_1)}(R_i)$		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-i\end{pmatrix}$
$D^{(W_2)}(R_i)$		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&i\end{pmatrix}$

表 10.22-3 O_h^7 群 W 点波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的 IR 基和矩阵表示

		$\{\epsilon\|0\}$	$\{C_{2x}\|0\}$	$\{C_{2z}\|\boldsymbol{v}\}$	$\{C_{2f}\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\sigma_y\|\boldsymbol{v}\}$	$\{\sigma_z\|\boldsymbol{v}\}$	$\{S_{4x}^-\|0\}$	$\{S_{4x}^+\|0\}$
$u_1^{(W_1)1}$	D_{11}^*	1	1					1	1
$u_2^{(W_1)1}$	D_{21}^*			1	1	1	1		
$u_1^{(W_1)i}$	D_{12}^*			-1	1	i	$-i$		
$u_2^{(W_1)i}$	D_{22}^*	1	-1					$-i$	i
$u_{-1}^{(W_2)-1}$	D_{11}^*	1	1					-1	-1
$u_{-2}^{(W_2)-1}$	D_{21}^*			1	1	-1	-1		
$u_{-1}^{(W_2)-i}$	D_{12}^*			-1	1	$-i$	i		
$u_{-2}^{(W_2)-i}$	D_{22}^*	1	-1					i	$-i$
$D^{(W_1)}(\{\gamma\|\boldsymbol{v}(\gamma)\})$		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-i\end{pmatrix}$
$D^{(W_2)}(\{\gamma\|\boldsymbol{v}(\gamma)\})$		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&i\end{pmatrix}$

如果用特征标方法做，则步骤如下．在两个线性独立的类算符 C_1 和 C_5 中，显然 C_5 为 CSCO-I．由乘法表 10.22-1 容易得到

$$C_5C_1=C_5,\ C_5^2=2iC_1.$$

C_5 的本征值为 $\nu=\pm(1+i)$，其本征矢量为

$$Q^{(1+i)}=\sqrt{\frac{1}{8}}(2C_1+(1-i)C_5),\ Q^{(-1-i)}=\sqrt{\frac{1}{8}}(2C_1+(-1+i)C_5),\qquad(10\text{-}137)$$

根据(10-100b)式，(10-137)式得到以下特征标

$$\chi^{(W_1)}(R_1)=2,\ \chi^{(W_1)}(R_7)=1+i;\ \chi^{(W_2)}(R_1)=2,\ \chi^{(W_2)}(R_7)=-1-i,$$

再由(10-136)式可得到其它类算符的特征标．表象群生成元的矩阵表示可选为

$$D^{(W_1)}(R_4)=\begin{pmatrix}0&-i\\1&0\end{pmatrix},\quad D^{(W_1)}(R_7)=\begin{pmatrix}1&0\\0&i\end{pmatrix};$$

$$D^{(W_2)}(R_4)=\begin{pmatrix}0 & -i\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ D^{(W_2)}(R_7)=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}.$$

习　　题

1．将 § 20(d) 中的表象群 $G_{\boldsymbol{k}}$ (即 $\mathscr{C}_{2v}$ 的二重覆盖群，乘法表见表 10.20-4) 当作抽象群 $G'_{\boldsymbol{k}'}$，将它的正则表示约化．比较 $G'_{\boldsymbol{k}}$ 和 $G'_{\boldsymbol{k}}$ 的不可约表示，并验证(10-80b)式．

2．求空间群 D^{14}_{4h} (群元见 § 10.6) 在一般点，以及 Γ, Σ, X 点的不可约基和不可约表示．D^{14}_{4h} 的布里渊区仍然是图 10•20-2．

3．求 O^7_h 群 X 点 ($\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_x=\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{b}_2$) 的表象群 G'_k 的不可约表示．

提示：$G_0(\boldsymbol{k})=D_{4h}$．$G'_k$ 群的 CSCO $C=(C_1,\ C_2)$, $C_1=\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}'-\{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}'$, $C_2=\{\sigma_{da}|0\}+\{\sigma_{db}|0\}$; $C(s)$ 选为 $C(s)=\{C^+_{4x}|\boldsymbol{v}\}'$．后一选法是为了使结果和 Kovalev 给出的表 T159 一致．

答案给在表 10.22-4．

表 10.22-4　O^7_h 群 X 点表象群 G'_k 的不可约表示

				h_1	h_3	h_4	h_2	h_{15}	h_{14}	h_{16}	h_{13}
IR 名称	$(C_1,\ C_2)$	$C(s)$		$\{\epsilon\|0\}$	$\{C_{2y}\|0\}$	$\{C_{2z}\|0\}$	$\{C_{2x}\|0\}$	$\{C^-_{4x}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{C^+_{4x}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{C_{2a}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{C_{2b}\|\boldsymbol{v}\}'$
ν_1	(0, 2)	1 −1		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$
ν_2	(0, −2)		$\delta^{(2)}_a$	+	+	+	+	+	+	+	+
ν_3	(2i, 0)	$-i$ i		$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}i&0\\0&-i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-i&0\\0&i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}i&0\\0&i\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-i&0\\0&-i\end{pmatrix}$
ν_4	(−2i, 0)		$\delta^{(4)}_a$	+	−	+	−	+	+	−	−

		h_{25}	h_{27}	h_{28}	h_{26}	h_{39}	h_{38}	h_{40}	h_{37}
		$\{I\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_y\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_z\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_x\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{S^+_{4x}\|0\}$	$\{S^-_{4x}\|0\}$	$\{\sigma_{da}\|0\}$	$\{\sigma_{db}\|0\}$
ν_1		$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$
ν_2	$\delta^{(2)}_a$	−	−	−	−	−	−	−	−
ν_3		$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\-i&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}0&i\\i&0\end{pmatrix}$
ν_4	$\delta^{(4)}_a$	+	−	+	−	+	+	−	−

1) $D^{(\nu_2)}(R_a)=\delta^{(2)}_a D^{(\nu_1)}(R_a)$, $D^{(\nu_4)}(R_a)=\delta^{(4)}_a D^{(\nu_3)}(R_a)$.

2) 这里的 IR 标号 ν_i 和 Kovalev 表 T159 的标号 τ^i 的关系为 $\nu_1=\tau^3$ $\nu_2=\tau^4$ $\nu_3=\tau^2$ $\nu_4=\tau^1$.

3) h_1, h_2, ⋯ 等等为 Kovalev 用的点群算符记号．

§ 10.23　空间群 CG 系数计算实例

虽然空间群 CG 系数十分重要，空间群的表示问题经过七十多年的努力可以算得上很成熟了，Berenson 和 Birman(1975) 以及其他人(见前文中所引的文献) 对空间群 CG 系数也都作过研究，但迄今为止，还只计算过极少数情形下的空间群 CG 系数．Birman (1974) 预言，一旦空间群 CG 系数可以容易地得到，它的很多重要应用会接踵而来．本节以计算 O^7_h 群 $X\otimes X\to X$ 和 $X\otimes W\to 2\Delta$ 的 CG 系数为例，说明用本征函数法计算空间群的 CG 系

数是非常方便的.

计算空间群的 CG 系数可归纳成以下步骤:

(1) 确定波矢选择规则(见 §10.19), 并指明要计算那个 $\boldsymbol{k}''$ 星的 CG 系数.

(2) 选择正则波矢 $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ 和 $\boldsymbol{k}''$.

(3) 对每一个正则波矢, 选择空间群的陪集代表

$$G=\sum_{\sigma}\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_\sigma\}G(\boldsymbol{k}),\quad G=\sum_{\sigma'}\{\beta_{\sigma'}|\boldsymbol{v}_{\sigma'}\}G(\boldsymbol{k}'),$$
$$G=\sum_{\sigma''}\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\}G(\boldsymbol{k}''),\tag{10-138}$$

陪集代表 $\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_\sigma\}$ 的选取不唯一. 不同的选取, 对应于空间群 IR 基矢 $u_{k\sigma\alpha}^{(\nu)}$ 的不同选取. 为了后面计算的方便, 尽可能选取非初始平移 $\boldsymbol{v}_\sigma$ 为零的元素 $\{\beta_\sigma|0\}$ 作为陪集代表.

然后求出波矢星 $^*\boldsymbol{k}$ 和 $^*\boldsymbol{k}'$ 中的所有波矢

$$\boldsymbol{k}_\sigma=\beta_\sigma\boldsymbol{k},\ \sigma=1,\ 2,\ \cdots,\ q;\ \boldsymbol{k}'_{\sigma'}=\beta_{\sigma'}\boldsymbol{k}',\ \sigma'=1,\ 2,\ \cdots,\ q'.\tag{10-139a}$$

(4) 找出满足

$$\boldsymbol{k}_\sigma+\boldsymbol{k}'_{\sigma'}=\boldsymbol{k}''+\boldsymbol{K}_m\tag{10-139b}$$

的所有"波矢对"$(\boldsymbol{k}_\sigma,\ \boldsymbol{k}'_{\sigma'})$, 或"指标对"$(\sigma\sigma')$. 以下为叙述方便起见, 我们假定只有两个对, 即$(\tau\tau')$和$(\sigma\sigma')$满足(10-139b)式.

(5) 利用本征函数法或现成的表(如 Kovalev 表) 找出表象群 $G'_{\boldsymbol{k}}$, $G'_{\boldsymbol{k}'}$ 和 $G'_{\boldsymbol{k}''}$ 的不可约矩阵.

(6) 求出构成表象群 $G'_{\boldsymbol{k}''}$ 的 CSCO-II 的那些元素 $\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}$ 在空间群表示 $(\nu{*}\boldsymbol{k})$ 和 $(\nu'{*}\boldsymbol{k}')$ 中的表示矩阵.

为了计算 CG 系数, 我们不必作出 $\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}$ 的整个表示矩阵, 而只需知道和 $(\tau,\ \sigma)$ $[(\tau',\ \sigma')]$有关的子矩阵. 例如

$$[\mathscr{D}^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\})]=\begin{matrix} & \tau & \sigma\\ \tau & \boldsymbol{D}(\tau\tau) & \boldsymbol{D}(\tau\sigma)\\ \sigma & \boldsymbol{D}(\sigma\tau) & \boldsymbol{D}(\sigma\sigma)\end{matrix},$$

$$[\mathscr{D}^{(\nu',\boldsymbol{k}')}(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\})]=\begin{matrix} & \tau' & \sigma'\\ \tau' & \boldsymbol{D}'(\tau'\tau') & \boldsymbol{D}'(\tau'\sigma')\\ \sigma' & \boldsymbol{D}'(\sigma'\tau') & \boldsymbol{D}'(\sigma'\sigma')\end{matrix},\tag{10-140a}$$

这里方括号代表矩阵的一部分, 而 $\boldsymbol{D}(\tau\sigma)$ 为 $h_\nu\times h_\nu$ 矩阵:

$$\boldsymbol{D}(\tau\sigma)\equiv D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(R_{\tau\sigma})=e^{-i\boldsymbol{k}_\tau\cdot\boldsymbol{v}_{\gamma''}}D^{(\nu,\boldsymbol{k})}(\{\beta_\tau^{-1}\gamma''\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_{\tau\gamma''\sigma}\}').\tag{10-140b}$$

这里利用了(10-89e)式并假定了 $\boldsymbol{v}_\sigma=0$, $\boldsymbol{v}_\tau=0$. 对带撇的量有类似的式子.

(7) 利用(10-108c)式, 进一步作出以下矩阵

$$M(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\})=\begin{matrix} & \tau\tau' & \sigma\sigma'\\ \tau\tau' & \boldsymbol{D}(\tau\tau)\otimes\boldsymbol{D}'(\tau'\tau') & \boldsymbol{D}(\tau\sigma)\otimes\boldsymbol{D}'(\tau'\sigma')\\ \sigma\sigma' & \boldsymbol{D}(\sigma\tau)\otimes\boldsymbol{D}'(\sigma'\tau') & \boldsymbol{D}(\sigma\sigma)\otimes\boldsymbol{D}'(\sigma'\sigma')\end{matrix}.\tag{10-141}$$

$$M(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}')=e^{i\boldsymbol{k}''\cdot\boldsymbol{v}_{\gamma''}}M(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}),$$

$M(\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\})$ 就是群元 $\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}$ 在由乘积基

$$|\tau1,\ \tau'1\rangle\cdots|\tau1,\ \tau'h_{\nu'}\rangle,\ |\tau2,\ \tau'1\rangle\cdots|\tau2,\ \tau'h_{\nu'}\rangle,\ \cdots|\tau h_\nu,\ \tau'h_{\nu'}\rangle,$$
$$|\sigma1,\ \sigma'1\rangle\cdots|\sigma1,\ \sigma'h_{\nu'}\rangle,\ |\sigma2,\ \sigma'1\rangle\cdots|\sigma2,\ \sigma'h_{\nu'}\rangle\cdots|\sigma h_\nu,\ \sigma'h_{\nu'}\rangle,\tag{10-142a}$$

张开的空间中的矩阵表示，这里

$$|\tau a,\ \tau' b\rangle \equiv |\boldsymbol{k}_\tau a,\ \boldsymbol{k}'_{\tau'} b\rangle \equiv u^{(\nu)}_{k_\tau a} u^{(\nu')}_{k'_{\tau'} b}. \tag{10-142b}$$

利用 (10–141) 式，可以找到表象群 $G'_{k''}$ 的 CSCO–II 在空间 (10–142a) 上的表示矩阵 $M(C)$ 和 $M(C(s))$.

(8) 将 $M(C)$ 和 $M(C(s))$ 同时对角化，求出对应于某 $-\gamma''$ 和某一 a'' 的 CG 系数.

(9) 然后再利用 (10–111b) 和 (10–111c) 式求出其余分量的 CG 系数.

例 1 求 O_h^7 群 $X(1)\otimes X(2)\to X(\nu'')$ 的 CG 系数

由表 10.22–4 可知 O_h^7 群在 X 点有四个二维不可约表示 $(\nu_i,\ X)\equiv X(i)$, $i=1, 2, 3, 4$. 按以上步骤，计算 CG 系数的过程如下：

(1) 利用 § 10.19 给出的方法，容易得到波矢星选择规则

$$X\otimes X = 3\Gamma \oplus 2X.$$

(2) 正则波矢可选为

$$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}''=\boldsymbol{k}_z=\left(\frac{1}{2}\quad \frac{1}{2}\quad 0\right).$$

这一选法和 Berenson 等(1975)的不同. 他们选的三个正则波矢各不相等，即

$$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_x,\ \boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}_y,\ \boldsymbol{k}''=\boldsymbol{k}_z$$

(3) 陪集代表可选为

$$\{\beta_2|\boldsymbol{v}_2\}=\{C^+_{31}|0\},\ \{\beta_3|\boldsymbol{v}_3\}=\{C^-_{31}|0\}. \tag{10-143a}$$

这一选取的优点是(1). 它们的非初始平移都为零. (2)在 C^+_{31} 的作用下，$\boldsymbol{k}_x$, $\boldsymbol{k}_y$ 和 $\boldsymbol{k}_z$ 轮换.

由 $\boldsymbol{k}_\sigma=\beta_\sigma \boldsymbol{k}$ 得(以 $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$, $\boldsymbol{b}_3$ 为基)

$$\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_z=\left(\frac{1}{2}\quad \frac{1}{2}\quad 0\right),\ \boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k}_x=\left(0\quad \frac{1}{2}\quad \frac{1}{2}\right),$$

$$\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k}_y=\left(\frac{1}{2}\quad 0\quad \frac{1}{2}\right). \tag{10-143b}$$

(4) 由此立即可知

$$\boldsymbol{k}_x+\boldsymbol{k}_y-\boldsymbol{k}_z\doteq(0\quad 0\quad 1).$$

因此"指标对" $(\tau\tau')=(23)$, $(\sigma\sigma')=(32)$.

(5) 见表 10.22–4.

(6) 如果 $G'_{k''}$ 群的 IR 是用本征函数法得到的，我们自然先知道它的 CSCO–II. 假定 $G'_{k''}$ 群的表示，表 10.22–4, 是从 Kovalev 表 T159 直接抄来的，则可以用以下方法容易地反推出 $G'_{k''}$ 群的 CSCO–II.

首先从表 10.22–4, 中写下不全为零的特征标矢量，列在表 10.23–4.

表 10.23–4 O_h^7 群 X 点表象群 G'_k 的不全为零的特征标

表示	$\{\epsilon\|0\}$	$\{C_{2z}\|0\}$	$\{C_{2a}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{C_{2b}\|\boldsymbol{v}\}'$	$\{\sigma_{da}\|0\}$	$\{\sigma_{db}\|0\}$
X_1	2	2	0	0	2	2
X_2	2	2	0	0	-2	-2
X_3	2	-2	$2i$	$-2i$	0	0
X_4	2	-2	$-2i$	$2i$	0	0

这里 $X_i\equiv X(i)\equiv(\nu_i,\ \boldsymbol{k})$. 由上表可知，$\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}'$ 和 $-\{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}'$ 属于同一类，$\{\sigma_{da}|0\}$ 和 $\{\sigma_{db}|0\}$ 属于同一类. 根据(10–100c)，上表也就是类算符特征标表. 容易看到

$$C_1 = \{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}' - \{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}', \quad C_2 = \{\sigma_{da}|0\} + \{\sigma_{db}|0\}. \tag{10-144}$$

有 $N'=4$ 套不同的本征值, N' 为线性独立的类算符数目. 因此 (C_1, C_2) 为 $G'_{k''}$ 群的 CSCO-I.

由(10-90a)和(10-89e)式及表10.22-4可算出构成 $G_{k''}$ 群 CSCO-II 的那些元素 $\{\gamma''|\boldsymbol{v}_{\gamma''}\}$ 的表示矩阵 $\mathscr{D}^{X_1}$ 和 $\mathscr{D}^{X_2}$.

$$\mathscr{D}^{X_j}(\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}) = \begin{pmatrix} -\varkappa i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda i \\ 0 & -\lambda i & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{D}^{X_j}(\{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}) = \begin{pmatrix} -\varkappa i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varkappa i \\ 0 & -\varkappa i & 0 \end{pmatrix}, \quad j=1, 2,$$

$$\mathscr{D}^{X_j}(\{\sigma_{da}|0\}) = (-1)^{j+1} \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \phi \\ 0 & \phi & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathscr{D}^{X_j}(\{\sigma_{db}|0\}) = (-)^{j+1} \begin{pmatrix} \epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 0 \end{pmatrix}, \quad j=1, 2,$$

$$\mathscr{D}^{X_j}(\{C_{4z}^{+}|\boldsymbol{v}\}) = \begin{pmatrix} -\lambda i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\varkappa i \\ 0 & -\lambda i & 0 \end{pmatrix}, \quad j=1, 2. \tag{10-145}$$

(7) 由(10-141)式和(10-145)式得到

$$M(\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}' - \{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}') = \begin{array}{c} \\ 23 \\ \\ 32 \\ \\ \end{array} \left(\begin{array}{cc|cc} \multicolumn{2}{c|}{23} & \multicolumn{2}{c}{32} \\ 0 & 0 & -\lambda & \varkappa \\ 0 & 0 & -\varkappa & \lambda \\ \hline -\lambda & \varkappa & 0 & 0 \\ -\varkappa & \lambda & 0 & 0 \end{array}\right)(i),$$

$$M(\{\sigma_{da}|0\} + \{\sigma_{db}|0\}) = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & -\epsilon & -\phi \\ 0 & 0 & -\phi & -\epsilon \\ \hline -\epsilon & -\phi & 0 & 0 \\ -\phi & -\epsilon & 0 & 0 \end{array}\right),$$

$$M(\{C_{4z}^{+}|\boldsymbol{v}\}') = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 0 & \lambda \\ 0 & 0 & -\lambda & 0 \\ \hline \varkappa & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varkappa & 0 & 0 \end{array}\right)(i), \tag{10-146}$$

$$M(\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}') = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \\ \hline -\lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 \end{array}\right)(i),$$

$$M(\{\sigma_{da}|0\}) = -\begin{pmatrix} & & & \phi \\ & 0 & \phi & \\ & \phi & 0 & \\ \phi & & & \end{pmatrix},$$

这里

$$\epsilon=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\ \lambda=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\ \phi=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \varkappa=\begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix},\ \mu=\begin{pmatrix}0 & i\\ 1 & 0\end{pmatrix}. \tag{10-147}$$

乘积基矢的顺序由(10-142)式决定. 令该式中 $(\tau\tau')=(23)$, $(\sigma\sigma')=(32)$, $h_v=h'_v=2$, 得到 8 个乘积基,依次为

$$\begin{aligned}&|\boldsymbol{k}_x1,\ \boldsymbol{k}_y1\rangle,\ |\boldsymbol{k}_x1,\ \boldsymbol{k}_y2\rangle,\ |\boldsymbol{k}_x2,\ \boldsymbol{k}_y1\rangle,\ |\boldsymbol{k}_x2,\ \boldsymbol{k}_y2\rangle;\\ &|\boldsymbol{k}_y1,\ \boldsymbol{k}_x1\rangle,\ |\boldsymbol{k}_y1,\ \boldsymbol{k}_x2\rangle,\ |\boldsymbol{k}_y2,\ \boldsymbol{k}_x1\rangle,\ |\boldsymbol{k}_y2,\ \boldsymbol{k}_x2\rangle.\end{aligned} \tag{10-148}$$

(8) 将 $M(C_1)=M(\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}'-\{C_{2b}|\boldsymbol{v}\}')$ 和 $M(C_2)=M(\{\sigma_{da}|0\}+\{\sigma_{db}|0\})$ 同时对角化,得到$(C_1,\ C_2)$的本征值为 $(0,\ 2)$, $(0,\ -2)$, $(2i,\ 0)$, 和 $(-2i,\ 0)$ 都为二重简并. 和表 10·22-4 对照,可知 CG 序列为

$$X(1)\otimes X(2)=X(1)\oplus X(2)\oplus X(3)\oplus X(4). \tag{10-149}$$

再将 $M(C(s))=M(\{C_{4z}^{+}|\boldsymbol{v}\}')$对角化,得到 $C(s)$的本征值 ±1(对应于 $X(1)$和 $X(2)$), 和$\mp i$(对应于 $X(3)$ 和 $X(4)$). 将 $(C_1.\ C_2,\ C(s))$ 的四组本征值 $(0,\ 2,\ 1)$, $(0,\ -2,\ 1)$, $(2i,\ 0,\ -i)$ 和 $(-2i,\ 0,\ -i)$代入本征方程, 得到四个特征向量, 对应于第一分量$(a''=1)$ 的 CG 系数,列在表 10.23-2 的奇数行.

根据(10-111b)式及表 10.22-4, CG 系数的第二分量$(b''=2)$可表为

$$\begin{aligned}&U_{k_z}^{(X_j)}(b''=2)=-M(\{C_{2a}|\boldsymbol{v}\}')U_{k_z}^{(X_j)}(a''=1),\ j=1,\ 2,\\ &U_{k_z}^{(X_j)}(b''=2)=i(-1)^{j}M(\{\sigma_{da}|0\})U_{k_z}^{(X_j)}(a''=1),\ j=3,\ 4.\end{aligned} \tag{10-150}$$

由(10-150)式, (10-146)式及表 10.23-2 的奇数行, 可以算出 $U_{k_z}^{(X_j)}(b''=2)$. 例如

$$U_{k_z}^{(X_1)}(b''=2)=i\left(\begin{array}{cccc|cccc} & & & & & & & 1\\ & 0 & & & & & 1 & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & 1 & & & \\ \hline & & & 1 & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & 1 & & & & 0 & & \\ 1 & & & & & & & \end{array}\right)\left(\begin{array}{c}1\\-1\\1\\-1\\ \hline -1\\-1\\1\\1\end{array}\right)=\left(\begin{array}{c}i\\i\\-i\\-i\\ \hline -i\\i\\-i\\i\end{array}\right)$$

第二分量的 CG 系数列在表 10.23-2 的偶数行.

求 $\sigma''\neq1$ 的 CG 系数,一般需用(10-111d)式. 当 ${}^*\boldsymbol{k}={}^*\boldsymbol{k}'={}^*\boldsymbol{k}''$ 时, $\{\beta_\sigma|\boldsymbol{v}_\sigma\}=\{\beta_{\sigma'}|\boldsymbol{v}_{\sigma'}\}=\{\beta_{\sigma''}|\boldsymbol{v}_{\sigma''}\}$, 这时问题特别简单,只需利用(10-85)式便可. 例如对 $\sigma''=2$, $\{\beta_{\sigma''}|0\}=C_{31}^{+}$,

$$\begin{aligned}u_{k_x}^{X(1)}&=C_{31}^{+}u_{k_z}^{X(1)}=C_{31}^{+}\sqrt{\frac{1}{8}}(x1y1-ix1y2-ix2y1+x2y2-y1x1+iy1x2+iy2x1+y2x2)\\ &=\sqrt{\frac{1}{8}}(y1z1-iy1z2-iy2z1+y2z2-z1y1+iz1y2+iz2y1+z2y2).\end{aligned} \tag{10-151}$$

由此可见,只要将表 10.23-2 中的表头中, x, y, z 轮换便可得到 $\sigma''=2$ 和 $\sigma''=3$ 的 CG 系数.

Saulevich 等 (1970) 和 Berenson 等 (1975) 都计算过 O_h^7 群 $X\otimes X$ 的 G 系数. 这两家的结果不一致,而我们的结果和 Berenson 等的完全一致.

表 10.23-2　O_h^7 群 $X(1)\otimes X(2)(\sigma''=1)$ 的 CG 系数 $C^{X(1),k;\sigma''}_{\nu_1 X(2),\,\nu_2;\,k''\sigma''\nu''}$

	(C_1, C_2)	$C(S)$	N	$x1y1$	$x1y2$	$x2y1$	$x2y2$	$y1x1$	$y1x2$	$y2x1$	$y2x2$
$X(1)$	$(0,\ 2)$	1	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	$-i$	$-i$	1	-1	i	i	-1
		-1	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-i$	1	1	$-i$	i	-1	-1	i
$X(2)$	$(0,\ -2)$	1	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	i	i	1	1	i	i	1
		-1	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	i	1	1	i	i	1	1	i
$X(3)$	$(2i,\ 0)$	$-i$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1
		i	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	i	i	$-i$	$-i$	$-i$	i	$-i$	i
$X(4)$	$(-2i,\ 0)$	$-i$	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1
		i	$\sqrt{\frac{1}{8}}$	i	$-i$	i	$-i$	i	i	$-i$	$-i$

1) 这里 $xayb$ 代表 $k_x a k_y b$.

例 2　求 $X(1)\otimes W(1)\to\Delta(\nu'')$ 的 CG 系数

(1) 波矢选择规则由(10–105f)式给出, 即 $X\otimes W=2\Delta\oplus W$.

(2) 正则波矢选为:

$$X\text{ 点 }\boldsymbol{k}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0\end{pmatrix},\ W\text{ 点 }\boldsymbol{k}'=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}\end{pmatrix},\ \Delta\text{ 点 }\boldsymbol{k}''=\begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0\end{pmatrix}$$

(3) X 点的陪集代表和 $\boldsymbol{k}_\sigma$ 同(10–143a)式一样. 对 W 点, $\{\beta_{\sigma'}|\boldsymbol{v}_{\sigma'}\}$ 和 $\boldsymbol{k}'_{\sigma'}$ 见下表:

σ'	1	2	3	4	5	6
$\{\beta_{\sigma'}\|\boldsymbol{v}_{\sigma'}\}$	$\{\epsilon\|0\}$	$\{C_{2y}\|0\}$	$\{C_{31}^+\|0\}$	$\{C_{33}^+\|0\}$	$\{C_{31}^-\|0\}$	$\{C_{32}^-\|0\}$
$\boldsymbol{k}'_{\sigma'}$	$\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\frac{3}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix}-\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}$

注意: 虽然 $\boldsymbol{k}'_2=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}$ 和 $\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{3}{4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}$ 等价, 但这里前者绝对不能用后者来代替, 否则就出错.

(4) $\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}'_5=\boldsymbol{k}''+(0\quad 1\quad 1)$, $\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}'_6=\boldsymbol{k}''+(0\quad 0\quad 1)$.

因此"指标对"$(\tau\tau')=(25)$, $(\sigma\sigma')=(36)$.

(5) 见表 10.22–4 和表 10.22–2.

(6) Δ 为内部点, 其表象群 $G_{k''}$ 和点群 $\mathscr{C}_{4v}$ 同构. 由表 8.3–6 知 $\mathscr{C}_{4v}$ 的 CSCO–II 为 $(C_{4z}^++C_{4z}^-,\ \sigma_x+\sigma_y,\ \sigma_y)$. 因此 $G'_{k''}$ 群的 CSCO–II 为

$$(C_1,\ C_2,\ C(s))=(\{C_{4z}^+|\boldsymbol{v}\}'+\{C_{4z}^-|\boldsymbol{v}\}',\ \{\sigma_x|\boldsymbol{v}\}'+\{\sigma_y|\boldsymbol{v}\}',\ \{\sigma_y|\boldsymbol{v}\}')\qquad(10\text{–}152)$$

而 $\boldsymbol{v}=\begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}$. 由(10–140)式及表 10.22–4 和表 10.22–2 得

$$[\mathscr{D}^{X(1)}(\{C_{4z}^+|\boldsymbol{v}\})]=\begin{array}{c}\\ 2\\ 3\end{array}\!\!\begin{array}{c}\begin{array}{cc}2 & 3\end{array}\\ \begin{pmatrix}0 & \varkappa\\ \lambda & 0\end{pmatrix}\end{array}(-i),\quad[\mathscr{D}^{X(1)}(\{C_{4z}^-|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}0 & \lambda\\ \varkappa & 0\end{pmatrix}(-i),$$

$$
\begin{aligned}
&[\mathscr{D}^{X(1)}(\{\sigma_x|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}\varkappa & 0\\ 0 & \lambda\end{pmatrix}(-i),\\
&[\mathscr{D}^{X(1)}(\{\sigma_y|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}\lambda & 0\\ 0 & \varkappa\end{pmatrix}(-i),\\
&[\mathscr{D}^{W(1)}(\{C_{4z}^{+}|\boldsymbol{v}\})]=\begin{matrix}5\\6\end{matrix}\begin{pmatrix}0 & -\mu i\\ \mu^{*} & 0\end{pmatrix}e^{-\frac{\pi}{4}i},\\
&[\mathscr{D}^{W(1)}(\{C_{4z}^{-}|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}0 & -\mu^{*}i\\ \mu & 0\end{pmatrix}e^{-\frac{\pi}{4}i},\\
&[\mathscr{D}^{W(1)}(\{\sigma_x|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}\varkappa i & 0\\ 0 & -\varkappa\end{pmatrix}e^{-\frac{\pi}{4}i},\\
&[\mathscr{D}^{W(1)}(\{\sigma_y|\boldsymbol{v}\})]=\begin{pmatrix}-\phi i & 0\\ 0 & \phi\end{pmatrix}e^{-\frac{\pi}{4}i}
\end{aligned}
\tag{10-153}
$$

这里 $\varkappa$, $\lambda\cdots$ 等为 2×2 矩阵[见(10-147)式].

(7) 由(10-141)式及上式得

$$
\begin{aligned}
&M(\{C_{4z}^{+}|\boldsymbol{v}\}')=\begin{matrix} & 25 & 36\\ 25 & \left(\begin{array}{c|c} 0 & \begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\mu\\ \hline \begin{pmatrix}-i & 0\\ 0 & i\end{pmatrix}\mu^{*} & 0\end{array}\right) & \\ 36 & & \end{matrix},\\
&M(\{C_{4z}^{-}|\boldsymbol{v}\}')=\left(\begin{array}{c|c} 0 & \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\mu^{*}\\ \hline \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\mu & 0\end{array}\right),\\
&M(\{\sigma_x|\boldsymbol{v}\}')=\left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix}0 & 1\\ -1 & 0\end{pmatrix}\varkappa & 0\\ \hline 0 & \begin{pmatrix}i & 0\\ 0 & -i\end{pmatrix}\varkappa\end{array}\right),\\
&M(\{\sigma_y|\boldsymbol{v}\}')=\left(\begin{array}{c|c} \begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\phi & 0\\ \hline 0 & \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\phi\end{array}\right),
\end{aligned}
\tag{10-154}
$$

这里

$$
M(\{\alpha|\boldsymbol{v}\}')=M(\{\alpha|\boldsymbol{v}\})e^{ik''\cdot v},\quad e^{ik''\cdot v}=e^{\frac{\pi}{4}i}.
\tag{10-155}
$$

令(10-142)式中的$(\tau\tau')=(25)$, $(\sigma\sigma')=(36)$,得到 8 个乘积基依次为:

$$
\begin{aligned}
&|21,\ 51\rangle,\ |21,\ 52\rangle,\ |22,\ 51\rangle,\ |22,\ 52\rangle;\\
&|31,\ 61\rangle,\ |31,\ 62\rangle,\ |32,\ 61\rangle,\ |32,\ 62\rangle.
\end{aligned}
\tag{10-156}
$$

(8) 将矩阵 $M(C_1)=M(\{C_{4z}^{+}|v\}')+M(\{C_{4z}^{-}|v\}')$ 和 $M(C_2)=M(\{\sigma_x|v\}')+M(\{\sigma_y|v\})'$ 同时对角化，得到四组单根 (2, 2)，(2, −2)，(−2, 2)，(−2, 2) 和一组四重根(0, 0)．由表 8.3-6 知道，(0, 0)对应于二维表示 E．因此这里二维表示 E 出现两次．于是得到空间群 CG 序列如下：

$$X(1)\otimes W(1)=\Delta(1)\oplus\Delta(2)\oplus\Delta(3)\oplus\Delta(4)\oplus 2\Delta(5). \tag{10-157}$$

对(C_1, C_2)的单根，可立即求出对应的本征矢量，列在表 10.23-3．对四重根(0, 0)，需进一步将 $M(\{\sigma_y|v\}')$对角化，它的本征值为 $a''=\pm1$．根据表 8.3-6 的约定，$a''=+1(-1)$ 对应于二维表示的第一(二)分量．对于 $\nu''=(0, 0)$，$a''=+1$，仍有二重简并，因此有二组线性独立的解．相互正交的两个矢量可选为

$$U_{k''}^{(\theta=1)}(a''=1)=\frac{1}{2}(1,\ -1,\ -1,\ -1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0),$$

$$U_{k''}^{(\theta=2)}(a''=1)=\frac{1}{2}(0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 1,\ i,\ -1,\ i). \tag{10-158}$$

(9) 令(8-33a)式中 $\varphi=90°$，得到 $\mathscr{C}_{4v}$ 群元 C_{4z}^{+} 在 E 表示中的矩阵为

$$D^{E}(C_{4z}^{+})=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

于是(10-111b)式可表为

$$U_{k''}^{(\theta)}(2)=\frac{1}{D_{21}^{E}(C_{4z}^{+})}M(\{C_{4z}^{+}|v\}')U_{k''}^{(\theta)}(1). \tag{10-159}$$

由(10-154)，(10-158)和(10-159)式，立即可算得 $U_{k''}^{(\theta)}(2)$，结果列在表 10.23-3．

再利用(10-111d)式，可得 $\sigma''\neq1$ 的 CG 系数．

表 10.23-3　O_h^7 群 $X(1)\otimes W(1)(\sigma''=1)$ 的 CG 系数 $C_{X(1)\sigma a,\,W(1)\sigma' a'}^{\Delta(\nu)k''a''}$

	C_1	C_2	$\{\sigma_y\|v\}'$	θ	N \ $\sigma a,\ \sigma' a'$	$\|21,51\rangle$	$\|21,52\rangle$	$\|22,51\rangle$	$\|22,52\rangle$	$\|31,61\rangle$	$\|31,62\rangle$	$\|32,61\rangle$	$\|32,62\rangle$
$\Delta(1)$	2	2			$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	1	1	1	$-i$	1	i
$\Delta(2)$	2	−2			$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	1	1	−1	−1	$-i$	−1	i
$\Delta(3)$	−2	2			$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	−1	1	1	−1	i	−1	$-i$
$\Delta(4)$	−2	−2			$\sqrt{\frac{1}{8}}$	1	1	1	−1	1	i	1	$-i$
$\Delta(5)$	0	0	1	1	$\frac{1}{2}$	1	−1	−1	−1				
			−1	1	$\frac{1}{2}$					1	$-i$	−1	$-i$
$\Delta(5)$	0	0	1	2	$\frac{1}{2}$					1	i	−1	i
			−1	2	$\frac{1}{2}$	1	1	−1	1				

§10.24 附 录

表 10.24-1 点群 O 的乘法表以及群元记号对照表

		ϵ	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}	C_{4x}^-	C_{4y}^-	C_{4z}^-	C_{4x}^+	C_{4y}^+	C_{4z}^+	C_{31}^-	C_{32}^-	C_{33}^-	C_{34}^-	C_{31}^+	C_{32}^+	C_{33}^+	C_{34}^+	C_{2a}	C_{2b}	C_{2c}	C_{2d}	C_{2e}	C_{2f}
E	ϵ	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
C_2^x	C_{2x}	2	1	4	3	8	23	19	5	21	20	12	11	14	13	18	17	16	15	7	10	9	24	6	22
C_2^y	C_{2y}	3	4	1	2	22	9	20	24	6	19	13	14	11	12	16	15	18	17	10	7	23	5	21	8
C_2^z	C_{2z}	4	3	2	1	24	21	10	22	23	7	14	13	12	11	17	18	15	16	20	19	6	8	9	5
$\bar{C}_4^x$	C_{4x}^-	5	8	24	22	2	16	11	1	18	13	19	7	20	10	9	23	6	21	12	14	15	3	17	4
$\bar{C}_4^y$	C_{4y}^-	6	21	9	23	11	3	17	14	1	16	22	8	5	24	10	19	20	7	15	18	4	13	2	12
$\bar{C}_4^z$	C_{4z}^-	7	20	19	10	18	11	4	17	12	1	21	23	9	6	8	5	22	24	2	3	14	15	13	16
C_4^x	C_{4x}^+	8	5	22	24	1	17	12	2	15	14	7	19	10	20	21	6	23	9	11	13	18	4	16	3
C_4^y	C_{4y}^+	9	23	6	21	13	1	18	12	3	15	5	24	22	8	19	10	7	20	16	17	2	11	4	14
C_4^z	C_{4z}^+	10	19	20	7	16	14	1	15	13	4	6	9	23	21	22	24	8	5	3	2	11	17	12	18
$\bar{C}_3^{xyz}$	C_{31}^-	11	14	12	13	21	19	22	6	7	5	15	17	18	16	1	2	3	4	8	24	10	9	20	23
$\bar{C}_3^{\bar{x}\bar{y}z}$	C_{32}^-	12	13	11	14	9	7	24	23	19	8	18	16	15	17	2	1	4	3	5	22	20	21	10	6
$\bar{C}_3^{x\bar{y}\bar{z}}$	C_{33}^-	13	12	14	11	23	10	5	9	20	22	16	18	17	15	3	4	1	2	24	8	19	6	7	21
$\bar{C}_3^{\bar{x}y\bar{z}}$	C_{34}^-	14	11	13	12	6	20	8	21	10	24	17	15	16	18	4	3	2	1	22	5	7	23	19	9
C_3^{xyz}	C_{31}^+	15	16	17	18	10	8	9	19	22	21	1	3	4	2	11	14	12	13	6	23	5	7	24	20
$C_3^{\bar{x}\bar{y}z}$	C_{32}^+	16	15	18	17	19	24	6	10	5	23	3	1	2	4	13	12	14	11	9	21	22	20	8	7
$C_3^{x\bar{y}\bar{z}}$	C_{33}^+	17	18	15	16	7	22	23	20	8	6	4	2	1	3	14	11	13	12	21	9	24	10	5	19
$C_3^{\bar{x}y\bar{z}}$	C_{34}^+	18	17	16	15	20	5	21	7	24	9	2	4	3	1	12	13	11	14	23	6	8	19	22	10
C_2^{xy}	C_{2a}	19	10	7	20	15	12	3	16	11	2	9	6	21	23	5	8	24	22	1	4	13	18	14	17
$C_2^{x\bar{y}}$	C_{2b}	20	7	10	19	17	13	2	18	14	3	23	21	6	9	24	22	5	8	4	1	12	16	11	15
C_2^{xz}	C_{2c}	21	6	23	9	14	2	15	11	4	18	8	22	24	5	7	20	19	10	17	16	1	12	3	13
C_2^{yz}	C_{2d}	22	24	8	5	4	15	13	3	17	11	10	20	7	19	6	21	9	23	14	12	16	1	18	2
$C_2^{x\bar{z}}$	C_{2e}	23	9	21	6	12	4	16	13	2	17	24	5	8	22	20	7	10	19	18	15	3	14	1	11
$C_2^{y\bar{z}}$	C_{2f}	24	22	5	8	3	18	14	4	16	12	20	10	19	7	23	9	21	6	13	11	17	2	15	1

表 10·24-2 点群操作对基矢 t_i 的作用

	简单立方 (Γ_c)			面心立方 (Γ_c^f)			体心立方 (Γ_c^v)		
ε	t_1	t_2	t_3	t_1	t_2	t_3	t_1	t_2	t_3
C_{2x}	t_1	$-t_2$	$-t_3$	$-t_1$	$-t_1+t_3$	$-t_1+t_2$	$-t_1-t_2-t_3$	t_3	t_2
C_{2y}	$-t_1$	t_2	$-t_3$	$-t_2+t_3$	$-t_2$	t_1-t_2	t_3	$-t_1-t_2-t_3$	t_1
C_{2z}	$-t_1$	$-t_2$	t_3	t_2-t_3	t_1-t_3	$-t_3$	t_2	t_1	$-t_1-t_2-t_3$
C_{31}^+	t_2	t_3	t_1	t_2	t_3	t_1	t_2	t_3	t_1
C_{32}^+	t_2	$-t_3$	$-t_1$	$-t_2$	t_1-t_2	$-t_2+t_3$	$-t_1-t_2-t_3$	t_1	t_3
C_{33}^+	$-t_2$	t_3	$-t_1$	t_1-t_3	$-t_3$	t_2-t_3	t_1	$-t_1-t_2-t_3$	t_2
C_{34}^+	$-t_2$	$-t_3$	t_1	$-t_1+t_3$	$-t_1+t_2$	$-t_1$	t_3	t_2	$-t_1-t_2-t_3$
C_{31}^-	t_3	t_1	t_2	t_3	t_1	t_2	t_3	t_1	t_2
C_{32}^-	$-t_3$	t_1	$-t_2$	$-t_1+t_2$	$-t_1$	$-t_1+t_3$	t_2	$-t_1-t_2-t_3$	t_3
C_{33}^-	$-t_3$	$-t_1$	t_2	t_1-t_2	$-t_2+t_3$	$-t_2$	t_1	t_3	$-t_1-t_2-t_3$
C_{34}^-	t_3	$-t_1$	$-t_2$	$-t_3$	t_2-t_3	t_1-t_3	$-t_1-t_2-t_3$	t_2	t_1
C_{4x}^+	t_1	t_3	$-t_2$	t_2-t_3	$-t_1+t_2$	t_2	$-t_3$	$-t_1$	$t_1+t_2+t_3$
C_{4y}^+	$-t_3$	t_2	t_1	t_3	$-t_1+t_3$	$-t_2+t_3$	$t_1+t_2+t_3$	$-t_1$	$-t_2$
C_{4z}^+	t_2	$-t_1$	t_3	t_1-t_3	t_1	t_1-t_2	$-t_2$	$t_1+t_2+t_3$	$-t_3$
C_{4x}^-	t_1	$-t_3$	t_2	$-t_2+t_3$	t_3	$-t_1+t_3$	$-t_2$	$t_1+t_2+t_3$	$-t_1$
C_{4y}^-	t_3	t_2	$-t_1$	t_1-t_2	t_1-t_3	t_1	$-t_2$	$-t_3$	$t_1+t_2+t_3$
C_{4z}^-	$-t_2$	t_1	t_3	t_2	$t_2\ \ t_3$	$-t_1+t_3$	$t_1+t_2+t_3$	$-t_3$	$-t_1$
C_{2a}	t_2	t_1	$-t_3$	$-t_1+t_3$	$-t_2+t_3$	t_3	$-t_1$	$-t_2$	$t_1+t_2+t_3$
C_{2b}	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$
C_{2c}	t_3	$-t_2$	t_1	$-t_1+t_2$	t_2	t_2-t_3	$-t_1$	$t_1+t_2+t_3$	$-t_3$
C_{2d}	$-t_1$	t_3	t_2	t_1	t_1-t_2	t_1-t_3	$t_1+t_2+t_3$	$-t_2$	$-t_3$
C_{2e}	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$
C_{2f}	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$	$-t_1$	$-t_3$	$-t_2$

1) 例如对面心立方: 有 $C_{2x}t_2=-t_1+t_3$, $C_{31}^+t_1=t_2$.

附　　录

附表 A1　置换群 $S_f(f\leqslant 6)$ 和酉群 $SU_n(n\leqslant 6)$ 不可约表示的维数

	[1]	[2]	[11]	[3]	[21]	$[1^3]$	[4]	[31]	[22]	[211]	$[1^4]$	[5]	[41]	[32]	[311]	[221]	$[21^3]$	$[1^5]$
S_f	1	1	1	1	2	1	1	3	2	3	1	1	4	5	6	5	4	1
SU_3	3	6	3	10	8	1	15	15	6	3	*	21	24	15	6	3	*	*
SU_4	4	10	6	20	20	4	35	45	20	15	1	56	84	60	36	20	4	*
SU_5	5	15	10	35	40	10	70	105	50	45	5	126	224	175	126	75	24	1
SU_6	6	21	15	56	70	20	126	210	105	105	15	252	504	420	336	210	84	6

	[6]	[51]	[42]	[411]	[33]	[321]	$[31^3]$	$[2^3]$	$[2^21^2]$	$[21^4]$	$[1^6]$
S	1	5	9	10	5	16	10	5	9	5	1
SU_3	28	35	27	10	10	8	*	1	*	*	*
SU_4	84	140	126	70	50	64	10	10	6	*	*
SU_5	210	420	420	280	175	280	70	50	45	5	*
SU_6	462	1050	1134	840	490	896	280	175	189	35	1

附表 A2　置换群 ORC 和 SU_n 群 CG 系数的位相因子

$\epsilon_1(\nu_1\nu_2\nu)$[定义见(4-153)和(7-101)式]

$[\nu_1]$	[1]		[2]		[11]		[3]		$[1^3]$		[2]		
$[\nu_2]$	[1]		[1]		[1]		[1]		[1]		[2]		
$[\nu]$	[2]	[11]	[3]	[21]	$[1^3]$	[21]	[4]	[31]	$[1^4]$	[211]	[4]	[31]	[22]
ϵ_1	1	−1	1	−1	1	1	1	−1	−1	1	1	−1	1

$[\nu_1]$	[11]			[2]		[21]			[4]		$[1^4]$		[31]		
$[\nu_2]$	[11]			[11]		[1]			[1]		[1]		[1]		
$[\nu]$	$[1^4]$	[211]	[22]	[31]	[211]	[31]	[211]	[22]	[5]	[41]	$[21^3]$	$[1^5]$	[41]	[32]	[311]
ϵ_1	1	−1	1	1	1	1	1	−1	1	−1	1	1	1	−1	1

$[\nu_1]$	[211]			[22]		[3]			$[1^3]$			[3]	
$[\nu_2]$	[1]			[1]		[2]			[11]			[11]	
$[\nu]$	[311]	[221]	$[21^3]$	[32]	[221]	[5]	[41]	[32]	[221]	$[21^3]$	$[1^5]$	[41]	[311]
ϵ_1	1	−1	−1	1	1	1	−1	1	1	1	1	1	1

$[\nu_1]$	$[1^3]$		[21]				[21]			
$[\nu_2]$	[2]		[2]				[11]			
$[\nu]$	[311]	$[21^3]$	[41]	[32]	[311]	[221]	[32]	[311]	[221]	$[21^3]$
ϵ_1	1	−1	1	−1	1	−1	1	−1	−1	1

参 考 文 献

[1] 陈金全，王凡，高美娟，(I)求特征标和不可约基的本征函数法，南京大学学报，1977年第二期，p. 148.
[2] 陈金全，王凡，高美娟，(II)内禀群和正则表示的完全分解，南京大学学报，1978年第二期，p. 110.
[3] 陈金全，高美娟，王凡，于祖荣，(III)本征函数法在点群上的应用，南京大学学报，1979年第四期.
[4] 陈金全，王凡，高美娟，(I)有限群表示论的新途径，物理学报，**26** (1977)，p. 307.
[5] 陈金全，王凡，高美娟，(II)置换群亚标准基和酉群 Gelfand 基，物理学报，**26** (1977)，p. 427.
[6] 陈金全，王凡，高美娟，(III)置换群外积约化系数和 SU_n 群 CG 系数，物理学报，**27** (1978)，p. 31.
[7] 陈金全，王凡，高美娟，(IV) $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基，物理学报，**27**(1978)，p. 203.
[8] 陈金全，高美娟，王凡，(V) $SU_3\supset SO_3$ 和 $SU_4\supset SU_2\times SU_2$ 分类基，**27**(1978)，p. 237.
[9] 陈金全，王凡，于祖荣，高美娟，置换群和酉群的关系，科学通报，**23**(1978)，p. 291.
[10] 陈金全，于祖荣，王凡，SU_n 群 CG 系数的一个递推公式，高能物理与核物理，**3**(1979)，p. 216.
[11] 陈金全，高美娟，王凡，重子和介子的 SU_n 波函数及表象变换，高能物理与核物理，**3**(1979)，p. 403.
[12] 陈金全，高美娟，置换群约化系数及其应用，科学出版社，(1981).
[13] 陈金全，关于拉卡代数中一些求和公式的推广，物理学报，**21**(1965)，p. 1817.
[14] 王凡，陈金全，施士元，1p 壳层核的 α 折合宽度，物理学报，**21**(1965)，p. 140.
[15] 贝衣曼(Bayman)，群论及其在核谱学中的应用，石生明译，上海科学技术出版社 (1963)
[16] 拉卡(Racah)，群论与核谱，高教出版社.
[17] 科顿(Cotton)，群论在化学中的应用，刘春万等译，科学出版社.
[18] 洛斯(Rose)，角动量理论，万乙译，上海科学技术出版社(1963).
[19] 夏蓉，原子核理论讲义，人民教育出版社(1961).
[20] 金星南等，克累布施-郭尔丹系数表，科学出版社.
[21] 山内恭彦，掘江久，回转群和对称群的应用，1962.
[22] 狄拉克，量子力学原理，陈成兴译，科学出版社 1966.
[23] 斯米尔诺夫，高等数学教程，三卷一分册，高等教育出版社，1956.
[24] 吉洪诺夫，数理方法(上册)，第二章 § 3·9，高等教育出版社，1956.
[25] 孙洪洲，Scientia Sinica **14**(1965)，480.
[26] 孙洪洲，高等学校自然科学学报，物理学版，1964，p. 69.
[27] 张宗烨，厉光烈，物理学报，**26**(1977)，p. 467.
[28] 陈选根(未发表).
[29] 朱诚久，有限群的完备算符，吉林大学学报，1979. No. 3，p. 43.
[30] 陈金全，王凡，高美娟，于祖荣，中国科学(英文版) **23**(1980)．1116.
[31] 文振翼，物理学报，**28**(1979)，88.
[32] 唐敖庆等，中国科学，**15**(1966)，610；吉林大学学报，1975 年第三、四期.
[33] 陶瑞宝，群论讲义(复旦大学印).
[34] 陈金全，王凡，高美娟，群表示的本征函数法讲义 (1979 年，江苏师范学院印).
[35] 高美娟，姚充国，陈益梅，本征函数法计算置换群 S_{11} 的特征标，1976 (未发表).
[36] 布洛欣采夫，量子力学原理.
[37] 孙洪洲，高能物理与核物理，**4**(1980)，73；**4**(1980)，137；**4**(1980)，271.
[38] 孙洪洲，韩其智，高能物理与核物理 **4** (1980)，588；$SU(3)$ 群的拉卡代数与阶化 $SU(3/1)$ 的不可约表示(预印本，1981).
[39] 陈金全，J. Math. Phys. **22** (1981)，1.
[40] 陈金全，高美娟，J. Math. Phys. **23**(1982)，928.
[41] 陈金全，D. Collinson，高美娟，J. Math. Phys. (1983).
[42] G. F. Koster，空间群以及它们的表示，物理译丛(固体物理)，1965 年第 2 期，p. 1.
[43] 叶崇远，吴以勤，安徽大学学报 1980 年第二期，p. 98.
[44] 周孝谦，群表示理论及其在核结构中应用的进展，见"物理学进展" p. 46，江苏科学技术出版社，1980.
[45] 谢希德，陈孝琛，空间群选择规则，物理学报 **20**(1964)，970.

REFERENCES

Akiyama, Y. and J. P. Draayer

[1] Computer Phys. Commun. **5** (1973), 405.

Akyeampong, D. A. and M. A. Rashid

[1] On the finite transformation of $SU(3)$, J. Math. Phys. **13** (1972), 1218.

Arima, A. and F. Iachello

Interacting boson model of collective states:

[1] (I) The vibrational limit, Ann. Phys. **99** (1976), 253.

[2] (II) The rotational limit, Ann. Phys. **111** (1978), 201.

[3] (III) The transition from $SU(5)$ to $SU(3)$, Ann. Phys. **115** (1978), 325.

[4] (IV) The O(6) limit, Ann. Phys. **123** (1979), 468.

Baird, G. E. and L. C. Biedenharn

On the representations of the semisimple Lie groups:

[1] (II) J. Math. Phys. **4** (1963), 1449.

[2] (III) The explicit conjugation operation for $SU(n)$, J. Math. Phys. **5** (1964), 1723.

[3] (IV) A canonical classification for tensor operators in $SU(3)$ J. Math. Phys. **5** (1964), 1730.

[4] (V) J. Math. Phys. **6** (1965), 1847.

Bayman, B. F.

[1] *Some Lectures on Groups and Their Applications to Spectroscopy*, Nordita, 1960.

Bayman, B. F. and A. Lande

[1] Tables of identical-particle fractional parentage coefficients, Nucl. Phys. **77** (1966), 1.

Berenson, R. and J. L. Birman

[1] Clebsch-Gordan coefficients for crystal space groups, J. Math. Phys. **16** (1975), 227.

Berenson, R., I. Itzkan and J. L. Birman

[1] Clebsch-Gordan coefficients for $^*X\otimes{}^*X$ in diamond O_h^7-Fd3m and rocksalt O_h^5-Fm3m, J. Math. Phys. **16** (1975), 236.

Biedenharn, L. C.

[1] On the representations of the semisimple Lie groups (I). The explicit construction of invariants for the unimodular unitary group in N dimensions, J. Math. Phys. **4** (1963), 436.

Biedenharn L. C., A. Giovannini and J. D. Louck

[1] Canonical definition of Wigner coefficients in $U(n)$, J. Math. Phys. **11** (1970), 2368.

Birman, J. L.

[1] Theory of Crystal Space Groups and Infra-Red and Raman Lattice Processes of Insulating Crystal, *Encyclopedia of Physics*, Vol. 25/2b, Ed. L. Genzel, Berling: Spring-Verlag, 1974.

[2] Space group selection rules: diamond and zinc blend, Phys. Rev. **127** (1962), 1093.

Boerner, H.

[1] *Representation of Group*, Amsterdam: North Holland, 1963.

Bohr, A. and B. R. Mottelson

[1] *Nuclear Structure*, Vol. I, Single Particle Motion, Benjamin, 1969.

[2] *Nuclear Structure*, Vol. II, Nuclear Deformation, Benjamin, 1975.

Bradley, C. J. and A. P. Cracknell

[1] *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*, Oxford: Clarendon Press, 1972.

Braunschweig, D.

[1] Reduced $SU(3)$ CFP's, Computer Phys. Commun. **14** (1978), 109.

Burnside, W.

[1] *Theory of Finite Order*, New York: Dover, 1955.

Butler, P. H.

[1] Calculation of j and jm symbols for arbitrary compact groups. (II) An alternative procedure for

angular momentum, Int. Quantum Chemistry, 10(1976), 599.

Butler, P. H. and B. G. Wybourne

[1] Calculation of j and jm symbols for arbitrary compact groups. (I) Methodology, Int. Quantum Chemistry, 10(1976), 581.

[2] (III) Application to $SO_3 \supset T \supset C_3 \supset C_1$, Int. Quantum Chemistry, 10(1976), 615.

Chen, Jin-Quan

[1] On the extension of some sum rules in the Racah algebra, Acta Phys. Sinica 21(1965), 1817.

[2] $SU(mn) \supset SU(m) \times SU(n)$ isoscalar factors and $S(f_1+f_2) \supset S(f_1) \times S(f_2)$ isoscalar factors, J. Math. Phys. 22(1981), 1.

[3] The $SU(m+n) \supset SU(m) \times SU(n)$ isoscalar factors. J. Phys. A: (to be published).

[4] A new approach to permutation group representation theory, J. Math. Phys. 23(1982), 928.

Chen, Jin-Quan and Mei-Juan Gao

[1] *Reduction Coefficients of the Permutation Group and Their Applications*, Beijing: Beijing Science Press, 1981.

Chen, Jin-Quan, Mei-Juan Gao and Fan Wang

[1] Physical method of group representation theory (V) The irreducible bases of $SU(3) \supset SO(3)$ and $SU(4) \supset SU(2) \times SU(2)$, Acta Phys. Sinica 27(1978), 237.

[2] On the phase problem and representation transformation of the $SU(n)$ wave functions for baryons and mesons. Phys. Energ. Fortis Phys. Nucl. 3(1979), 408.

Chen, Jin-Quan, Mei-Juan Gao, Fan-Wang and Tzu-rong, Yu

[1] A new approach to representation theory of finite groups (III). Application of eigenfunction method to point groups, Nanjing Daxue Xuebao (J. of Nanjing University) No. 4(1979), 37.

Chen, Jin-Quan, Fan Wang and Mei-Juan Gao

[1] A new approach to representation theory of finite groups (I) The eigenfunction method for characters and irreducible bases, Nanjing Daxue Xuebao (J. Nanjing Univ.) No. 2(1977), 148.

[2] A new approach to representation theory of finite groups (II) The Intrinsic group and resolution of regular representations, Nanjing Daoxue Xuebao No. 2 (1978), 110.

[3] Physical method of group representation theory (I). A new approach to the theory of finite group representation, Acta Phys. Sinica 26(1977), 307. (transl: Chinese Phys. 1(1981), 533.)

[4] Physical method of group representation theory (II) The quasistandard bases of permutation groups and the Gel'fand bases of unitary groups. Acta Phys. Sinica 26(1977), 427. (English translation: Chinese Phys. 1(1981), 542.)

[5] Physical method of group representation theory (III) The outer-product reduction coefficients of the permutation group and the Clebsch-Gordan coefficients of $SU(n)$ group, Acta Phys. Sinica 27 (1978), 31.

[6] Physical method of group representation theory (IV) The irreducible bases of $SU(mn) \supset SU(m) \times SU(n)$ and $SU(m+n) \supset SU(m) \times SU(n)$, Acta Phys. Sinica 27(1978), 203.

[7] Intrinsic Lie group and nuclear collective rotation about intrinsic axes, J. Phys. A: 16(1983), 1347.

Chen, Jin-Quan, Fan Wang, Mei-Juan Gao and Tzu-Rong Yu

[1] A new method of calculation for molecular shell model, Scientia Sinica 23(1980), 1116.

Chen, Jin-Quan, Fan Wang, Tzu-Rong Yu and Mei-Juan Gao

[1] On the relations between permutation group and unitary groups, Kexu Tongbao 23(1978), 291.

Chen, Jin-Quan, Tzu-Rong Yu and Fan Wang

[1] A recursive formula for the Clebsch-Gordan coefficients of the group $SU(n)$, Phys. Energ Fortis Phys. Nucl. 3(1979), 216.

Chen, Jin-Quan, David Collinson and Mei-Juan Gao

[1] Transformation coefficients of permutation groups J. Math. Phys. 1983 (to be published).

Chen, Jin-Quan, Yi-Jin Shi, Da Hsuan Feng and M. Vallieres

[1] Symmetry and application of $SU(mn) \supset SU(m) \times SU(n)$ coefficients of fractional parentage, Nucl. Phys. A 393(1982), 122

Chen, Jin-Quan, Mei-Juan Gao, Yi-Jin Shi, M. Vallieres and Da Hsuan Feng

[1] Tables of One-body CFP for $SU(mp+nq/mq+np) \supset SU(m/n) \times SU(p/q)$ and $SU(mn) \supset SU(m) \times$

$SU(n)$ Nucl. Phys. 1984 (to be published).

Chen, Jin-Quan, Xuan-Gen Chen and Mei-Juan Gao

[1] The Clebsch-Gordan coefficients and isoscalar factors of the graded unitary group $SU(m/n)$, J. Phys. A: Math. Gen. **16** (1983), L47.

[2] The Casimir invariants and Gel'fand basis of the graded unitary group $SU(m/n)$, J. Phys. A: Math. Gen. **16** (1983), 1361.

[3] The isoscalar factor for $SU(m+p/n+q) \supset SU(m/n) \times SU(p/q)$ and $SU(m/n) \supset SU(m) \times SU(n)$ and $SU(m+n) \supset SU(m) \times ST(n)$ J. Phys. A: Math. Gen (to be published).

[4] The Clebsch-Gordan coefficients of the graded unitary group $SU(m/n)$, J. Phys. A: Math. Gen. **16** (1983).

Chen, Jin-Quan, Mei-Juan Gao and Guang-Qun Ma

[1] Progress in group representation theory and space group representation (to be published) (preprint, 1983).

Chen, Hsiao-Shen and Hsi-Teh Hsieh

[1] Reductions of the symmetrized and antisymmetrized space group representations, Acta Phys. Sinica **21** (1965), 519.

Chen, Xuan-Gen

[1] A recursive method for constructing the generalized projection operator, 1979 (unpublished).

Chihonov, A. N.

[1] Equations in Mathematical Physics (in Russian) Vol. I. Chapter 2, Moscow, 1953.

Cook, C. L. and G. Murtaza

[1] Clebsch-Gordan coefficients for the group $SU(6)$, Nuovo Cimento, **39** (1965), 7095.

Cotton, F. A.

[1] *Chemical Application of Group Theory*, New York: Wiley, 1971.

Dalitz, R. H. and A. Gal

[1] Strangeness analogue states in $^9_\Lambda Be^*$, Ann. Phys. **131** (1981), 314.

DeGrand, T. A. and R. L. Jaffe

[1] Excited states of confined quarks, Ann. Phys. **100** (1976), 425.

DeShalit, A. and I. Talmi

[1] *Nuclear Shell Theory*, New York: Academic Press, 1963.

de Swart, J. J.

[1] The Octet model and its Clebsch-Gordan coefficients, Rev. Mod. Phys. **35** (1963), 916.

Dirac, P. A. M.

[1] *The Principle of Quantum Mechanics*, Oxford: Clarendon Press, 1958.

Dirl, R.

[1] Clebsch-Gordan coefficients for corepresentation, J. Math. Phys. **21** (1980), 961; ibid 968; ibid 975; ibid 983; ibid 989; ibid 997.

Draayer, J. P. and Y. Akiyama

[1] Wigner and Racah coefficients for $SU(3)$, J. Math. Phys. **14** (1973), 1904.

Edmonds, A. R.

[1] *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, N. J.: Princeton University Press, 1957.

Eisenberg, J. M. and W. Greiner

[1] *Nuclear Theory* Vol. I. *Nuclear Model*, Amsterdam: North Holland, 1970.

Eisenhart, L. P.

[1] *Continuous Groups of Transformations*, Princeton, N. J.: Princeton University Press, 1933.

Elliott, J. P.

[1] Collective motion in the nuclear shell model (I) Classification schemes for states of mixed configurations, Proc. Roy. Soc. (London) **A245** (1958), 128.

[2] Collective motion in the nuclear shell model (II) The introduction of intrinsic wave functions, Proc. Roy. Soc. (London) **A245** (1958), 562.

Elliott, J. P. and A. M. Lane

[1] The nuclear shell model, *Encyclopedia of Physics* Vol. 39, p. 16. Ed. Flügge, Berlin: Spring Verlag, 1957.

Elliott, J. P. and M. Harvey

[1] Collective motion in the nuclear shell model (III) The calculation of spectra, Proc. Roy. Soc. (London) **A272** (1963), 557.

Elliott, J. P. and P. G. Dawber

[1] *Symmetry in Physics*, Vol. 1, 2. London: McMillan Press, 1979.

Elliott, J. P., J. Hope and H. A. Jahn

[1] Theoretical studies in nuclear structure IV B, Phil. Trans. Roy. Soc. (London) **A246** (1953), 241.

Feynman, R. P.

[1] *The Feynman Lectures on Physics*, Vol. III, Reading Mass: Addison Wesley, 1964.

Fieck, G.

[1] Symmetry adaption reduced to tabulated quantities, Theor. Chim. Acta **44**(1977), 279.

Gao, Mei-Juan, Chong-Guo Yao, Yi-Mei Chen and Jin-Quan Chen

[1] The Calculation of the characters of the permutation group S_{11} by the eigenfunction method. (1976) (unpublished).

Gamba, A.

[1] Lie-like approach to the theory of representation of finite groups, J. Math. Phys. **10** (1969), 872.

Gel'fand, I. M.

[1] The center of an infinitesimal group algebra, Mat. Sb. **26** (1950), 103.

Gel'fand, I. M., R. A. Minlos and Z. Ya. Shapiro

[1] *Representations of the Rotation and Lorentz Groups and Their Applications*, New York: Pergamon Press, 1963.

Gel'fand, I. M. and M. L. Zetlin

[1] Matrix elements for the unitary groups, Dokl. Akad. Nauk. **71**(1950), 825.

Gell-Man, M. and Y. Ne'eman

[1] *The Eightfold Way*, New York: Benjamin, 1964.

Gilmore, R.

[1] *Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications*, New York: Wiley, 1974.

Griffith, J. S.

[1] *The Irreducible Tensor Method for Molecular Symmetry Groups*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1962.

[2] *The Theory of Transitional Ions*, Cambridge Univ. Press, 1961.

Haacke, E. M., W. Moffat and P. Savaria

[1] A calculation of $SU(4)$ Clebsch-Gordan coefficients, J. Math. Phys. **17**(1976), 2041.

Hamermesh, M.

[1] *Group Theory and Its Application to Physical Problems*, Reading Mass: Addison-Wesley, 1962.

Harter, W. G. and C. W. Patterson

[1] Alternative basis for the theory of complex spectra II, Phys. Rev. **A13**(1976), 1067.

Harvey, M.

[1] On the fractional parentage expansions of color-singlet six quark state in a cluster model, Nucl. Phys. **352**(1981), 301.

Hecht, K. T.

[1] $SU(3)$ recoupling and fractional parentage in the 2s-1d shell, Nucl. Phys. **62**(1965), 1.

Hecht, K. T. and D. Braunschweig

[1] Few nucleon $SU(3)$ parentage coefficients and α-particle spectroscopic amplitudes for core excited states in s-d shell nuclei, Nucl. Phys. **A244**(1975), 365.

Hecht, K. T. and S. C. Pang

[1] On the Wigner supermultiplet scheme, J. Math. Phys. **10**(1969), 1571.

Horie, H.

[1] Representations of the symmetric group and the fractional parentage coefficients, J. Phys. Soc. Japan

19 (1964), 1783.

Hsieh Hsi-Teh and Hsiao-Shen Chen

[1] Space group selection rules, Acta Phys. Sinica **20** (1964), 970

Itzykson, C. and M. Nauenberg

[1] Unitary groups: Representations and decompositions, Rev. Mod. Phys. **38** (1966), 95.

Jahn, H. A.

[1] Theoretical studies in nuclear structure I. Enumeration and classification of the states arising from the filling of the nuclear d-shell, Proc. Roy. Soc. (London) **A201** (1950), 516.

[2] Theoretical studies in nuclear structure II. Nuclear d^2, d^3 and d^4 configuration fractional parentage coefficients and central force matrix elements, Proc. Roy. Soc. (London) **A205** (1951), 192.

[3] Direct evaluation of fractional parentage coefficients using Young operators. General theory and $\langle 4|2, 2\rangle$ coefficients, Phys. Rev. **96** (1954), 989.

Jahn, H. A. and H. van Wieringen

[1] Thoretical studies in nuclear structure IV. Wave functions for the nuclear p-shell, Part A. $\langle p^n|p^{n-1}, p\rangle$ fractional parentage coefficients, Proc. Roy. Soc. (London) **A209** (1951), 502.

Jarikina, M. E.

[1] *Rudiment of Molecular Orbital Theory*, Chapter 3.7 (in Russian) Moscow, 1975.

Johnston, D. F.

[1] Group theory in solid state physics, Reports on Progress in Phys. **23** (1960), 66.

Jones, H.

[1] *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States*, Amsterdam: North-Holland, 1975. p. 87.

Kaplan, I. G.

[1] The transformation matrix of permutation group and construction of the orbital wave function of a multishell configuration, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **41** (1961), 560.

[2] Orbital fractional parentage coefficients for a configuration consisting of several shells, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **41** (1961), 790.

Killingbeck, J.

[1] Commutating operator approach to group representation theory, J. Math. Phys. **11** (1970), 2268.

[2] The class sum operator approach for the point groups O and D_4, J. Math. Phys. **14** (1973), 185.

Koster, G. F.

[1] Space groups and their representations, *Solid State Physics* Vol. 5, p. 173, Ed. F. Seitz and D. Turnbull, New York: Academic Press, 1957.

Koster, G. F., J. O. Dimmock, R. G. Wheeler and H. Statz

[1] *Properties of the Thirty-Two Point Groups*, Cambridge, Mass: MIT Press, 1963.

Kovalev, O. V.

[1] *Irreducible Representations of the Space Groups*, New York: Gordan-Breach, 1965.

Kramer, P.

[1] Orbital fractional parentage coefficients for the harmonic oscillator shell model, Z. Für Physik **205** (1967), 181.

[2] Recoupling coefficients of the symmetric group for shell and cluster model configuration, Z. Für Physik **216** (1968), 68.

Kramer, P. and T. H. Seligman

[1] Studies in the nuclear cluster model II, Nucl. Phys. **A136** (1969), 545.

Kukulin, V. I., Yu. F. Smirnov and L. Majling

[1] Wave functions for mixed configurations and the Racah algebra of $SU(4)$, Nucl. Phys. **A103** (1967), 681.

Lezuo, K. J.

[1] The symmetric group and the Gel'fand basis of $U(3)$, J. Math. Phys. **13** (1972), 1389.

Lipkin, H. J.

[1] *Lie Groups for Pedestrians*, Amsterdam: North-Holland, 1966.

Littlewood, D. E.

[1] *The Theory of Group Characters*, Oxford: Oxford University Press 1950.

Louck, J.

[1] Group theory of harmonic oscillators in n-dimensional space, J. Math. Phys. **6**(1965), 1786.

[2] Recent progress toward a theory of tensor operators in the unitary groups, Am. J. Phys. **38**(1970), 3.

Louck, J. D. and L. C. Biedenharn

[1] Canonical unit adjoint tensor operator in $U(n)$, J. Math. Phys. **11**(1970), 2368.

Louck, J. D. and H. W. Galbraith

[1] Eckart vectors, Eckart frames and polyatomic molecules, Rev. Mod. Phys. **48**(1976), 69.

Löwdin, P. O.

[1] Group algebra, convolution algebra and applications to quantum mechanics, Rev. Mod. Phys. **39** (1967), 259.

Machacek, M. and Y. Tomozawa

[1] $SU(6)$ isoscalar factor for the product $405\times 56\rightarrow 56$, 70^*, J. Math. Phys. **17**(1976), 458.

Matsen, F. A. and C. J. Nein

[1] Spin-free quantum chemistry XXII, Int. Quantum Chem., **20**(1981), 861, and the references therein.

Matveev, V. A. and P. Sorba

[1] Quark analysis of multibaryonic system, Nuovo Cimento **45**(1978), 257.

McNamee, P. S. J. and F. Chilton

[1] Tables of Clebsch-Gordan coefficients of $SU(3)$, Rev. Mod. Phys. **36**(1964), 1005.

McWeeny, R.

[1] *Symmetry-An Introduction to Group Theory and Its Applications*, New York: Pergamon Press, 1963.

Miller, W. Jr.

[1] *Symmetry Groups and Their Applications*, New York: Academic Press, 1973.

Morse, P. M. and H. Feshbach

[1] *Methods of Theoretical Physics*, Part 1, p. 884. New York: McGraw-Hill, 1953.

Moshinsky, M.

[1] The harmonic oscillator and supermultiplet theory, I, Nucl. Phys. **31**(1962), 384.

[2] Bases for the irreducible representations of the unitary groups and some applications, J. Math. Phys. **4** (1963), 1128.

[3] Gel'fand states and the irreducible representations of the symmetric group, J. Math. Phys. **7**(1966), 691.

[4] *Group Theory and the Many-Body Problem*, New York: Gordon Breach, 1968.

Paldus, J.

[1] Group theoretical approach to the configuration interaction and perturbation theory calculations for atomic and molecular system, J. Chem. Phys. **61**(1974), 5321.

[2] Unitary group approach to the many-electron correlation problem: Relation of Gel'fand and Weyl tableau formulations, Phys. Rev. **A14**(1976), 1620.

[3] Many-electron correlation problem: A group theoretical approach, in *Theoretical Chemistry*, Vol. **2** Advances and Perspective. New York: Academic Press, 1976.

Paldus, J. and P. E. S. Wormer

[1] Configuration interaction matrix element II. Graphical approach to the relationship between unitary group generators and permutations, Int Quantum Chemistry **16**(1979), 1307.

Partensky, A.

[1] On the eigenvalues of the invariant operators of the unitary unimodular group $SU(n)$, J. Math. Phys. **13**(1972), 621.

[2] On the generalized exchange operators for $SU(n)$, J. Math. Phys. **13**(1972), 1503.

Patterson, C. W. and W. G. Harter

[1] Cannonical symmetrization for unitary bases I. Canonical Weyl bases, J. Math. Phys. **17**(1976), 1125.

[2] Cannonical symmetrization for unitary bases II. Boson and fermion bases, J. Math. Phys. **17** (1976), 1137.

Racah, G.

[1] *Group Theory and Spectroscopy*, Notes from Princeton, 1951.

Robinson, G. de B.

[1] *Representation Theory of the Symmetric Group*, Edingburgh University Press, 1961.

Rose, M. E.

[1] *Elementary Theory of Angular Momentum*, New York: Wiley, 1957.

Rotenberg, E., R. Bivins, N. Metropolis and J. K. Wooten

[1] *The 3-j and 6-j Symbols*, Cambridge Mass: MIT Press, 1959.

Rutherford, D. E.

[1] *Substitutional Analysis*, Edingburgh University Press, 1948.

Salam, A.

[1] The formalism of Lie groups, in *Theoretical Physics*, Vienna: International Atomic Energy Agency, 1963: p. 173.

Saulevich, L. K., D. T. Sviridov and Yu. F. Smirnov

[1] Sov. Phys.-Crystall. **15**(1970), 355.

Shelepin, L. A.

[1] Group theoretical method in physics, in *Proc. of the P. N. Lebdev Phys. Institute*, Vol. 70, Ed. S. Y. Skolbe'tsyn.

Shindler, S. and R. Mirman

[1] The decomposition of the tensor product of representations of the symmetric group, J. Math. Phys. **18** (1977), 1678.

[2] Generation of the Clebsch-Gordan coefficients for S_n, Computer Phys. Commun. **15**(1978), 131.

Slater, J. C.

[1] *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. I *Electronic Structure of Molecules*, New York: McGraw Hill, 1960.

[2] *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. II *Symmetry and Energy Band in Crystals*, New York: McGraw Hill, 1962.

[3] Space groups and wave function symmetry in crystals, Rev. Mod. Phys. **37**(1965), 68.

Slater, J. C., G. F. Koster and J. H. Wood

[1] Symmetry and free electron properties of the Gallium energy bands, Phys. Rev. **126**(1962), 1307.

Smirnov, V. E.

[1] Advanced Mathematics (in Russian) Vol. III, Part A, Moscow, 1951.

So, S. I. and D. Strottman

[1] Wigner coefficients for $SU(6) \supset SU(3) \times SU(2)$, J. Math. Phys. **20**(1979), 153.

Sokolov, A. V. and V. P. Shirokovskii

[1] Group theoretical method in quantum solid state physics, Usp. Fiz. Nauk **60** (1956), 617.

Strottman, D.

[1] Evaluation of $SU(6) \supset SU(3) \times SU(2)$ Wigner coefficients, J. Math. Phys. **20**(1979), 1643.

[2] Multiquark baryons and the MIT bag model, Phys. Rev. **D20** (1979), 748.

Sullivan, J. J.

[1] Permutation symmetry and the N-electron problem, Phys. Rev. **A5**(1972), 29.

Sun, Hung-Zhou

[1] A study of the SU(3) wave functions, Scientia Sinica **14**(1965), 430.

[2] On the irreducible representations of the compact simple Lie groups of rank two I, Phys. Energ. Fortis Phys. Nucl. **4**(1980), 37.

[3] On the irreducible representations of the compact simple Lie groups of rank two II, Phys. Energ. Fortis Phys. Nucl. **4**(1980), 137.

[4] On the irreducible representations of the compact simple Lie groups of rank two III, Phys. Energ. Fortis Phys. Nucl. **4**(1980), 271.

Sun, Hung-Zhou and Qi-Zhi Han

[1] On the irreducible representations of the simple Lie groups I. The tensor basis for the infinitesimal generators of the classical Lie groups, Phys. Energ. Fortis Phys. Nucl. **4**(1980), 588.

Szydick, P. and C. Werntz

[1] Alpha particle continuum states, Phys. Rev. B138(1965), 866.

Tang, Au-Chin et al

[1] Studies on the ligand field theory I, Journal of Jilin University No. 3(1975), 57.

[2] Studies on the ligand field theory II, Journal of Jilin University No. 4(1975), 73.

[3] Studies on the ligand field theory, Scientia Sinica 15(1966), 610.

Tang, Y. C., M. LeMere and D. R. Thompson

[1] Resonanting-group method for nuclear many body problems, Phys. Reports 47(1978), 168.

Tao, Rui-Bao

[1] *Group Theory* (to be published by Shanghai Science and Technology Press).

Vanagas, V.

[1] *Algebraic Method in Nuclear Theory* (in Russian), Mintis, Vilnius, 1972.

Vergados, J. D.

[1] $SU(3)\supset R_3$ Wigner coefficients in the $2s$–$1d$ shell, Nucl. Phys. A111(1968), 681.

Wen, Chen-Yi

[1] A unitary group treatment for strong crystal field in octahedral symmetry, Acta. Phys. Sinica 28(1979), 88.

Weyl, H.

[1] *The Classical Groups*, Princeton, N. J.: Princeton University Press, 1946.

Wigner, E. P.

[1] *Group Theory and its Applications to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*. New York: Academic Press, 1959.

Willians, A. S. and D. L. Pursey

[1] Particle permutation symmetry of multishell states I. Two shells, J. Math. Phys. 17(1976), 1383.

Wormer, P. E. S. and J. Paldus

[1] Configuration interaction matrix elements I. Algebraic approach to the relationship between unitary group generators and permutations, Int. Quantum Chemistry 116(1979), 1307.

Wybourne, B. G.

[1] *Classical Groups for Physicists*, New York: Wiley, 1974.

Yamanouchi, T.

[1] On the construction of unitary irreducible representation of the symmetric group, Proc. Phys.-Math. Soc. Japan 19(1937), 436.

Yamanouchi, T. et al

[1] *The Application of the Rotational Group and Symmetric Group* (Chinese translation), Beijing Science Press, 1966.

Ye Chong-Yuan and Yi-Qin Wu

[1] The finding of irreducible bases for the point M of the space group O_h^3 by the eigenfunction method of group representation theory, Anhui Daxue Xuebao No. 2(1980), 98.

Yilmaz, H.

[1] *Introduction to the Theory of Relativity*, Blaisdell Pub. Comp. 1965.

Young, A.

[1] 1900~1935 Proc. London Math. Soc. see Rutherford for references.

Zhang, Zong-Ye and Guang-Lie Li

[1] Symmetry classification for excited states of hyper nuclei Acta Phys. Sinica 26(1977), 467.

Zhu, Chen-Jiu.

[1] The complete operator of finite group, J. Jilin Univ. 1980 No. 4, p. 87.

Zhu, Chen-Jiu and Jin-Quan Chen

[1] A new approach to permutation group representation II, J. Math. Phys. 1983 (to be published).

索 引